

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ УКРАИНЫ
СУМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

На правах рукописи

Ляшенко Яков Александрович

УДК 539.62:621.891



**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ КИНЕТИЧЕСКИМИ РЕЖИМАМИ
ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ**

01.04.07 — физика твердого тела

**Диссертация
на соискание ученой степени доктора
физико–математических наук**

**Научный консультант
д.ф.–м.н., профессор
Хоменко Алексей Витальевич**

Сумы – 2016

СОДЕРЖАНИЕ

ПЕРЕЧЕНЬ УСЛОВНЫХ СОКРАЩЕНИЙ.....	8
ВВЕДЕНИЕ	9
РАЗДЕЛ 1. ГРАНИЧНЫЙ РЕЖИМ ТРЕНИЯ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПИСАНИЯ (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)	20
1.1. Экспериментальные методики и результаты исследований режима граничного трения	20
1.1.1. Аппарат поверхностных сил	20
1.1.2. Прерывистый режим трения и классические модели его описания	24
1.1.3. Модель фазовых переходов	29
1.1.4. Зависимость силы трения от скорости	31
1.1.5. Зависимость силы трения от внешней нагрузки и температуры	33
1.1.6. Влияние формы молекул смазочного материала	35
1.1.7. Эффекты памяти	36
1.1.8. Неньютоновская вязкость граничных смазок и обобщенная диаграмма Герси – Штрибека	38
1.2. Модель сухого трения Прандтля – Томлинсона	43
1.2.1. Формулировка модели	43
1.2.2. Статическая и кинетическая силы трения	44
1.2.3. Предел сильного затухания	46
1.2.4. Фазовая диаграмма	47
1.2.5. Прерывистый (<i>stick-slip</i>) режим	48
1.3. Модель Френкеля – Конторовой	49
1.4. Кинетическая модель граничного трения Карлсона – Батисты.....	52
1.4.1. Формулировка модели	52

1.4.2. Результаты моделирования	54
1.5. Термодинамическое представление переходов между статическим и кинетическим трением в режиме граничной смазки (модель Попова)	57
1.5.1. Подход, основанный на модели Френкеля – Конторовой, описывающей движение в периодическом потенциале	58
1.5.2. Упругая деформация как управляющий параметр	63
1.5.2.1. Формулировка модели и упругие напряжения	63
1.5.2.2. Пластические и вязкие свойства смазочного слоя	66
1.5.2.3. Переход слоя из упругого в вязкое состояние	67
1.5.2.4. Скорость пластического течения как функция температуры вблизи точки фазового перехода	68
1.6. Выводы к разделу 1	70
РАЗДЕЛ 2. ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ КИНЕТИЧЕСКИМИ РЕЖИМАМИ ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ	72
2.1. Обоснование методики исследований	73
2.2. Фазовый переход первого рода (симметричный потенциал)	81
2.2.1. Основные уравнения и прерывистый режим при сдвиге поверхностей в одну сторону	81
2.2.1.1. Свободная энергия	81
2.2.1.2. Стационарные состояния и фазовая диаграмма	84
2.2.1.3. Сила трения	88
2.2.1.4. Кинетика плавления	92
2.2.1.5. Прерывистый режим	96
2.2.2. Описание периодического внешнего воздействия	100
2.2.2.1. Трибологическая система	100
2.2.2.2. Кинетика плавления	102

2.3. Фазовый переход первого рода (несимметричный потенциал).....	105
2.3.1. Основные уравнения и прерывистый режим при сдвиге поверхностей в одну сторону	106
2.3.1.1. Свободная энергия, стационарные состояния и фазовая диаграмма	106
2.3.1.2. Сила трения и кинетика плавления	110
2.3.1.3. Прерывистый режим при непрерывном увеличении скорости	113
2.3.2. Описание периодического внешнего воздействия (численный эксперимент)	115
2.4. Фазовый переход второго рода	119
2.4.1. Исследование гистерезиса деформаций	119
2.4.2. Свободная энергия и стационарная сила трения	124
2.4.3. Влияние изменения управляющих параметров	129
2.5. Сравнение граничного режима трения с сухим и гидродинамическим режимами.....	130
2.5.1. Сухое трение	131
2.5.2. Жидкостное трение	134
2.6. Выводы к разделу 2	136
РАЗДЕЛ 3. ОПИСАНИЕ ЭФФЕКТОВ ПАМЯТИ ПРИ УЧЕТЕ УНИВЕРСАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ СМАЗОЧНОГО МАТЕРИАЛА ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ И ГРАДИЕНТА СКОРОСТИ	138
3.1. Описание зависимости вязкости от температуры.....	139
3.2. Влияние температурной зависимости вязкости на трибологическую систему.....	141
3.2.1. Стационарная сила трения	141
3.2.2. Кинетика трибологической системы и прерывистый режим	143
3.2.3. Влияние температуры и скорости	147

3.3. Эффекты памяти при фазовом переходе второго рода	149
3.3.1. Статическая сила трения	150
3.3.2. Скольжение после длительной остановки внешнего привода .	153
3.4. Эффекты памяти при фазовом переходе первого рода	156
3.4.1. Свободная энергия и тип фазового перехода	157
3.4.2. Сила трения	163
3.4.3. Кинетика плавления и прерывистый режим	165
3.4.4. Влияние квазистатической силы трения	167
3.5. Выводы к разделу 3	170

РАЗДЕЛ 4. ВЛИЯНИЕ НА ГРАНИЧНЫЙ РЕЖИМ ТРЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ И НАНОРАЗМЕРНЫХ НЕРОВНОСТЕЙ

172

4.1. Трение между двумя поверхностями с учетом наноразмерных неровностей	173
4.1.1. Одномерная модель	173
4.1.1.1. Приближение невзаимодействующих доменов	176
4.1.1.2. Приближение средней толщины	179
4.1.2. Трехмерная модель	181
4.2. Влияние пространственной неоднородности	190
4.2.1. Процедура моделирования	190
4.2.2. Результаты	194
4.3. Учет упругости контактирующих тел в режиме граничного трения	198
4.3.1. Формулировка задачи и процедура расчета	198
4.3.2. Результаты моделирования	203
4.3.3. Влияние температуры	207
4.4. Метод наноструктурирующего выглаживания как способ получения упрочненных поверхностей с микроразмерными неровностями	208

4.4.1. Модель	210
4.4.2. Результаты моделирования и обсуждение	213
4.5. Выводы к разделу 4	219

РАЗДЕЛ 5. ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕЙ НАГРУЗКИ НА ПОВЕРХНОСТИ ТРЕНИЯ 221

5.1. Несимметричный потенциал	222
5.1.1. Избыточный объем как параметр порядка	222
5.1.2. Основные уравнения	224
5.1.3. Термодинамическое и сдвиговое плавление	226
5.1.4. Сила трения	231
5.1.5. Прерывистый режим	233
5.2. Симметричный потенциал	237
5.2.1. Основные уравнения	238
5.2.2. Термодинамическое и сдвиговое плавление	239
5.2.3. Сила трения	241
5.2.4. Прерывистый режим	243
5.3. Связь между параметрами порядка избыточного объема и модуляции плотности	244
5.3.1. Симметричный потенциал	245
5.3.2. Несимметричный потенциал	253
5.3.3. Фазовый переход второго рода	254
5.3.4. Влияние внешней нагрузки	256
5.3.4.1. Фазовый переход второго рода	256
5.3.4.2. Фазовый переход первого рода	260
5.4. Выводы к разделу 5	262

РАЗДЕЛ 6. НЕРАВНОВЕСНАЯ ЭВОЛЮЦИОННАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ 263

6.1. Учет влияния температуры поверхностей трения	264
6.1.1. Внутренняя энергия и стационарные состояния	264
6.1.2. Система кинетических уравнений	267
6.1.3. Кинетика трибологической системы	270
6.2. Многомерный термодинамический потенциал	272
6.2.1. Внутренняя энергия и основные уравнения	273
6.2.2. Влияние скорости и сдвиговое плавление	276
6.2.3. Влияние температуры и нагружения	279
6.3. Модель скольжения по границам зерен в процессе пластической деформации	282
6.4. Выводы к разделу 6	284
ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ	286
БЛАГОДАРНОСТИ	290
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	291
Приложение А	325

ПЕРЕЧЕНЬ УСЛОВНЫХ СОКРАЩЕНИЙ

SFA – аппарат поверхностных сил (surface forces apparatus)

ОМЦТС – октаметилциклотетрасилоксан

УГД – упругогидродинамический

SS - прерывистый режим (stick-slip)

DF – сухое трение (dry friction)

SF – жидкостное трение (sliding friction)

GPU – графический процессор (graphics processing unit)

CPU – центральный процессор (central processing unit)

ИПД – интенсивные пластические деформации

НЭТ – неравновесная эволюционная термодинамика

ГЗ – граница зерна

СП – сверхпластичность

ВВЕДЕНИЕ

Интерес к изучению процессов трения существовал всегда. Это связано с тем, что мы сталкиваемся с трением на каждом шагу. Благодаря трению мы перемещаемся, едим, предметы удерживаются на своих местах, и т.д. Основные режимы трения, возникающие при контакте твердых тел, разделенных слоем смазочного материала, были показаны на диаграмме Герси – Штрибека [1], предложенной еще в 1902 году. На диаграмме обозначен граничный режим трения, соответствующий ультратонкой толщине смазочного материала между трущимися поверхностями. Однако, исследование граничного режима в те годы не представлялось возможным, поэтому на классической диаграмме он показан пунктирной линией. Позже экспериментально было выяснено, что в граничном режиме реализуется больший коэффициент трения, чем в жидкостном, что приводит к увеличению износа. С другой стороны, современные эксперименты показывают, что возможен режим, в котором сила трения настолько мала, что верхняя поверхность соскальзывает с нижней даже без внешнего воздействия. В граничном режиме зачастую нарушается хорошо известный закон Амонтона. Например, в экспериментальной работе [2] показано, что коэффициент статического трения с ростом нагрузки уменьшается, что связано с уменьшением количества монослоев смазочного материала. Поэтому исследование граничного трения имеет высокое фундаментальное и прикладное значение. Современное оборудование позволяет проводить прямые наблюдения за процессами, происходящими в области контакта, поэтому в последние годы появляется большое количество экспериментальных и теоретических работ по исследованию граничного режима в различных условиях. Диссертационная работа посвящена изучению граничного режима трения между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями при наличии ультратонкого слоя смазочного материала между ними. Также обсуждается и трение шероховатых поверхностей.

Актуальность темы. В последние годы в различных отраслях науки и техники находят широкое применение различные микромеханические системы [3]. Они используются в биомедицине [4, 5], при построении новых источников энер-

гии [6], в системах позиционирования в микро- и наноэлектронике [7] и т.д.. Наноскопические системы позиционирования представляют наноразмерные механические системы, специально для которых создаются наноподшипники [8], наномоторы [9] и другие движущиеся части. Одним из примеров таких систем являются накопители на жестких магнитных дисках, в которых для уменьшения износа между трущимися деталями помещаются ультратонкие смазочные слои [10]. При функционировании таких систем между контактирующими частями возникает сила трения, которая должна быть строго контролируемой, поскольку при превышении допустимых значений дорогостоящие механизмы могут преждевременно выйти из строя. Для уменьшения трения используются смазочные материалы, находящиеся в зоне контакта поверхностей [3, 11]. Ввиду малого размера систем толщина смазочного слоя, как правило, не превышает несколько атомарных диаметров, а поверхности трения атомарно-гладкие [12, 13]. Такой режим трения получил название граничного. Многие эксперименты показали, что в граничном режиме трения свойства смазочных материалов существенно отличаются от свойств объемных смазок или даже от свойств смазочных слоев, которые всего лишь на несколько нанометров толще. Поэтому на протяжении последних нескольких десятилетий проводятся как экспериментальные, так и теоретические исследования процессов граничного трения [14–20]. Было выяснено, что в режиме граничного трения существует ряд эффектов, не наблюдаемых в случае объемных смазок. Это эффект сдвигового плавления; наличие различных типов прерывистого движения, вызванного периодическими фазовыми переходами между структурными состояниями смазочного материала; аномальное увеличение вязкости смазочного слоя с уменьшением его толщины; отличие температур плавления и затвердевания смазки от аналогичных температур для тех же веществ в объемных системах; эффекты памяти; наличие нескольких типов кинетических режимов трения; сложные зависимости вязкости от температуры, толщины слоя, давления и градиента скорости; многократное увеличение (иногда до 10 порядков) времен релаксации в тонких слоях [13]. К тому же описанные системы работают в довольно широком диапазоне температур — это могут быть как комнатные тем-

пературы, так и криотемпературы в устройствах, используемых на искусственных спутниках Земли. На сегодняшний день, несмотря на большое количество экспериментальных [14] и теоретических [3] работ, а также результатов компьютерного моделирования [13], не существует единого подхода, который позволил бы описать все эти наблюдаемые особенности. Поэтому изучение процессов граничного трения имеет высокую актуальность, в частности в рамках термодинамического представления, предложенного в данной диссертационной работе, которое позволило описать большое количество экспериментально наблюдаемых эффектов в рамках единого подхода.

Связь работы с научными программами и темами. Диссертационная работа выполнена на кафедре моделирования сложных систем Сумского государственного университета. Диссертант был научным руководителем следующих научно-исследовательских работ: "Моделирование пространственно неоднородных явлений граничного трения в кинетическом и статическом режимах", при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины в рамках гранта Президента Украины (№ 0115U004662, 2015 г.); "Термодинамическая теория проскальзывания по границам зерен в проблеме сверхпластичности наноструктурированных металлов", при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины в рамках гранта Президента Украины (№ 0113U007248, 2013 г.); "Феноменологическая теория граничного трения в трибологических наносистемах", при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины в рамках гранта Президента Украины (№ 0112U007318, 2012 г.); "Реологические свойства трибологических систем в режиме граничного трения" (№ 0111U009623, 2011–2016 гг.) и исполнителем работ "Неравновесная термодинамика фрагментации металлов и трения пространственно-неоднородных граничных смазок между поверхностями с наноразмерными неровностями", при поддержке Министерства образования и науки Украины (№ 0115U000692, 2015–2017 гг.); "Моделирование трения металлических наночастиц и граничных пленок жидкостей, которые взаимодействуют с атомарно-гладкими поверхностями", при поддержке Министерства образова-

ния и науки Украины (№ 0112U001380, 2012–2014 гг.); ”Физика формирования потоков заряженных частиц в приборах для диагностики материалов атомной энергетики“, при поддержке Министерства образования и науки Украины (№ 0109U001378, 2009–2011 гг.); ”Структурное состояние и механическое поведение наноструктурных материалов и сплавов“, при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины и Российского фонда фундаментальных исследований (№ 0109U007301, 2009–2010 гг.); ”Статистическая нелинейная теория динамических фазовых режимов граничного трения в нанорезисторах“, при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины (№ 0107U008898, 2009–2010 гг.).

Цель и основные задачи исследования. Целью диссертационной работы является установление основных физических закономерностей процессов, происходящих при фазовых переходах между кинетическими режимами граничной смазки, зажатой между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями, при их сдвиге.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

- разработать феноменологическую модель фазовых переходов в ультратонком слое смазочного материала в режиме граничного трения, основываясь на теории фазовых переходов Ландау;
- на основе разработанной модели описать эффекты термодинамического и сдвигового плавления, получить аналитические выражения для критических скоростей сдвига и температур в случаях фазовых переходов первого и второго рода;
- провести учет зависимости вязкости смазочного материала от температуры и градиента скорости, построить в рамках модели обобщенную на граничный режим диаграмму Герси – Штрибека;
- в рамках модифицированного термодинамического представления провести учет влияния внешней нагрузки на режимы трения;
- провести исследование влияния пространственно неоднородного распределения параметра порядка и наноразмерных неровностей поверхностей на кинетику системы;

— исследовать особенности внешнего периодического воздействия на трибологическую систему и провести сравнение полученных результатов с известными экспериментальными данными;

— в рамках предложенного подхода описать экспериментально наблюдаемые эффекты памяти и провести описание статической силы трения при учете универсальной зависимости вязкости от температуры и градиента скорости, а также при модификации термодинамического потенциала;

— в результате численного моделирования сравнить режимы трения, соответствующие ньютоновским, дилатантным и псевдопластическим смазкам, определить условия уменьшения трения;

— теоретически описать экспериментально наблюдаемый прерывистый режим движения, объяснить причины его возникновения;

— обобщить результаты исследований на случай контактирующих поверхностей, обладающих упругостью, и между которыми существует обмен энергией за счет процессов теплопроводности.

Объект исследования — фазовые переходы, процессы термодинамического и сдвигового плавления, наблюдаемые при трении атомарно-гладких твердых поверхностей при наличии наноразмерного смазочного слоя между ними.

Предмет исследования — режимы трения в трибологических системах различных типов, в частности прерывистый режим движения.

Методы исследования. При построении моделей, на основе которых в диссертации исследуются процессы граничного трения, использовалась теория фазовых переходов Ландау [21–23]. Для достижения поставленных целей использовались известные численные методы [24], а также математическое моделирование. Изучение кинетики рассматриваемых процессов проводилось с использованием уравнений Ландау — Халатникова и Ланжевена, а для описания пространственно неоднородного распределения параметров — уравнение Гинзбурга — Ландау. Для нахождения пространственных распределений напряжений, силы трения и упругих деформаций по площади смазочного слоя использовался метод редукции размерности [25, 26]. Дифференциальные уравнения решались с по-

мощью методов Рунге – Кутты и Эйлера, а также явных разностных схем. Проводился анализ полученных результатов и их сравнение с экспериментальными и теоретическими данными других авторов.

Научная новизна полученных результатов состоит в том, что в диссертации впервые:

1. В рамках теории фазовых переходов Ландау при использовании в качестве параметра порядка модуляции плотности и избыточного объема описан фазовый переход первого рода между структурными состояниями смазочного материала, зажато между атомарно-гладкими твердыми поверхностями, при их сдвиге. Определена связь между таким образом определенными параметрами порядка. Показано, что в широком диапазоне параметров динамической трибологической системы наблюдается прерывистый режим движения, являющийся одной из основных причин разрушения трущихся деталей в микромеханизмах.
2. Проведен учет универсальной зависимости вязкости граничной смазки от температуры и градиента скорости и показано, что при низких температурах в трибологической системе реализуется статическая сила трения, наличие которой позволило теоретически описать широко распространенных ”стоп-старт“ экспериментов. На основе такого описания объяснены экспериментально наблюдаемые в режиме граничного трения эффекты памяти. Показано, что к ним может приводить статическая сила трения или многократное увеличение времен релаксации основных величин в режиме покоя.
3. В рамках построенной модели фазовых переходов в режиме граничного трения проведен учет влияния пространственно неоднородного распределения параметра порядка по площади смазочного материала, находящегося в зоне контакта твердых тел. Показано, что после первого акта плавления смазки за счет многократного увеличения относительной скорости сдвига смазочный материал стремится к однородной структуре, и далее устанавливается периодический прерывистый режим движения, что подтверждается экспе-

риментально.

4. Явно учтено влияние внешней нагрузки на контактирующие поверхности при их сдвиге трения и показано, что при наличии граничной смазки между ними увеличение уровня нагружения приводит к тому, что фазовый переход первого рода между кинетическими режимами трения заменяется фазовым переходом второго рода. Это объясняет нетривиальное влияние нагрузки на стационарные режимы прерывистого трения.
5. В рамках метода редукции размерности проведен учет упругих свойств контактирующих тел, разделенных слоем граничной смазки, при их сдвиге с постоянной скоростью. Выяснено, что по площади их контакта устанавливается неоднородное распределение упругих напряжений, что приводит к возникновению в трибологической системе фронтов плавления и затвердевания. Это, в свою очередь, приводит к установлению режима с осциллирующей силой трения, причем на поведение системы критическим образом влияет соотношение между временами релаксации упругой деформации и параметра порядка.
6. Описано влияние на процесс граничного трения наноразмерных неровностей контактирующих поверхностей твердых тел. Показано, что они могут приводить к неоднородному плавлению смазочного слоя по площади контакта, когда реализуется доменная структура с двумя типами доменов, определяемых значением параметра порядка. В итоге нарушается периодичность зависимостей силы трения от времени.

Практическое значение полученных результатов. Поскольку разработанный подход описывает и объясняет многие экспериментально наблюдаемые эффекты в режиме граничного трения, результаты работы могут быть использованы при проектировании различных устройств в микромеханике и биоинженерии, в частности для разработки искусственных суставов, устройств позиционирования в микроэлектронике, аэрокосмических устройств и т.д. В частности, описаны причины возникновения прерывистого режима трения, который наблюдается

в широком диапазоне параметров и часто приводит к преждевременному износу и разрушению трущихся деталей в наноразмерных системах. Полученные результаты позволяют спрогнозировать и свести к минимуму вероятность возникновения такого режима, что приведет к более длительному сроку эксплуатации микромеханических систем. Также в работе построены фазовые диаграммы, которые показывают различные режимы трения в зависимости от параметров трибологической системы. Использование этих диаграмм позволит выбирать оптимальный режим работы трибологической системы в зависимости от конкретно поставленных задач. Результаты работы фундаментального характера используются в учебном процессе Сумского государственного университета при преподавании дисциплин "Моделирование физических процессов и систем", "Теория фракталов", "Медицинская и биологическая физика", а также при подготовке магистерских и дипломных работ по специальности "Прикладная математика". Часть результатов, полученных с использованием метода редукции размерности, используется как фундамент для проведения дальнейших теоретических и экспериментальных исследований в области механики твердого тела, а также в учебном процессе в Институте механики Берлинского технического университета (Technische Universität Berlin, Germany).

Личный вклад соискателя. Материал диссертации основывается на результатах исследований, выполненных при непосредственном участии диссертанта или под его научным руководством. Физические идеи и методики их исследования, научные выводы и положения, выносимые на защиту, принадлежат лично диссертанту и изложены в работах [27–82]. В диссертации обобщены результаты исследований, выполненных автором самостоятельно [31, 36, 43, 47, 48, 61, 64, 65, 72–78] и в соавторстве [27–30, 32–35, 37–42, 44–46, 49–60, 62, 63, 66–71, 79–82]. Часть результатов получена в соавторстве с научным консультантом проф. А. В Хоменко. Некоторые результаты получены совместно с доктором Бо Перссоном [33, 34] (Исследовательский центр Юлиха, Германия) и проф. В. Л. Поповым [27, 28, 30, 63] (Берлинский технический университет, Германия) под их непосредственным руководством во время работы диссертанта в

указанных организациях. Исследования, представленные в двух последних разделах диссертации, выполнены совместно с д.ф.-м.н. Метловым Л. С. (ДонФТИ НАНУ). Ряд работ выполнен под руководством диссертанта совместно с к.ф.-м.н. Н. Н. Манько и к.ф.-м.н. А. Н. Заскокой. Соискатель во всех опубликованных работах принимал полноценное участие на всех этапах исследования: в постановке задач, написании компьютерных программ, непосредственно при проведении расчетов, в обсуждении и интерпретации полученных результатов, оформлении и публикации научных работ. В публикациях [29, 31, 32, 35–39, 41, 43–45, 47–54, 56–62, 64–70, 72–80, 82] диссертанту принадлежит ведущая роль в выборе и обосновании направления исследований. В работах [27, 28, 30, 33, 34, 42, 46, 55, 63, 71, 81] участие автора сводилось к аналитическому и численному решению поставленных задач. В обзорной статье [40], опубликованной совместно с научным консультантом, диссертант выполнил часть работы, содержащую термодинамическую модель, представленную в диссертационном исследовании. Основная часть полученных результатов докладывалась соискателем лично на международных конференциях и семинарах, в том числе зарубежных. Лично автором подготовлены тексты статей [29–31, 36–39, 41, 43, 44, 47–54], статьи в материалах конференций [60–62] и тезисы докладов [63–65, 72–78, 80, 82].

Апробация результатов диссертации. Основные научные и практические результаты диссертации докладывались и обсуждались на следующих международных и национальных конференциях и семинарах: Всеукраїнській школі-семінарі і конкурсі молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України (Львов, 2011 (лауреат первой премии), 2014 г.); International conference "Joint ICTP-FANAS conference on trends in nanotribology" (Trieste, Miramare, Italy, 2011); International conference "Conference on friction and energy dissipation in man-made and biological systems" (Trieste, Miramare, Italy, 2013); German-Russian workshop "Tribology in aerospace applications: damping, wear and structural dynamics in aerospace systems" (Berlin, Germany, 2014); Trilateral German-Ukrainian-Russian workshop "Analysis and control of surface modification applied

to machinery parts under severe plastic deformations“ (Berlin, Germany, 2015); International conference IEEE International scientific conference on electronics and nanotechnology ”ELNANO“ (Київ, 2014, 2015, 2016 гг.); школі-семінарі ”Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах“ (Суми, 2014 г.); International conference ”Nanomaterials: applications and properties“ (Алушта, 2011, 2013 гг.; Львов, 2014 г.); Міжнародній науковій конференції ”Фізико-хімічні основи формування і модифікації мікро- та наноструктур ФММН“ (Харьков, 2010, 2011 гг.); International conference ”Statistical physics: modern trends and applications“ (Львов, 2012 г.); XV International conference ”Dynamical system modelling and stability investigation“ (Київ, 2011 г.); Международной конференции ”Высокие давления. Фундаментальные и прикладные аспекты“ (Судак, 2010, 2012 гг.); International conference ”Physics of liquid matter: modern problems“ (Київ, 2010 г.); International conference ”Low temperature physics“ (Харьков, 2010, 2011, 2013 гг.); International conference ”Multifunctional nanomaterials: NanoEuroMed“ (Ужгород, 2011 г.); Пятнадцатой международной конференции ”Моделирование и исследование устойчивости динамических систем“ (Київ, 2011 г.); Десятій відкритій науковій конференції Інституту прикладної математики та фундаментальних наук (ІМФН) (Львов, 2012 г.); Міжнародній конференції молодих учених і аспірантів ”ІЕФ-2013“ (Ужгород, 2013 г.); Міжнародній конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ”ЕВРИКА“ (Львов, 2010, 2011, 2012, 2013 гг.); Семинарах Берлинского технического университета (Technische Universität Berlin), Института физики НАН Украины и Сумского государственного университета.

Публикации. Основные результаты диссертационной работы изложены в 56 публикациях [27–82]: 7 статьях в профильных изданиях Украины [38, 39, 46, 50–52, 54] и 21 статье в специализированных зарубежных высокорейтинговых журналах [27–37, 40–45, 47–49, 53], из которых 25 статей [27–29, 31, 33–51, 53, 54] в изданиях, которые индексируются наукометричными базами данных Scopus и Web of Science; 8 статьях в материалах конференций [55–62], 3 из которых [55–57] в изданиях, которые индексируются наукометричными базами дан-

ных Scopus и Web of Science, и 20 тезисах докладов конференций [63–82].

Структура и содержание работы. Диссертационная работа состоит из введения, шести разделов, выводов, списка использованных источников, в котором содержится 316 наименований на 34 страницах. Объем диссертации составляет 325 страниц, из которых 279 – основной текст, 136 рис., в том числе 2 рисунка на 2 отдельных листах.

РАЗДЕЛ 1

ГРАНИЧНЫЙ РЕЖИМ ТРЕНИЯ: ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ОПИСАНИЯ (ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)

1.1. Экспериментальные методики и результаты исследований режима граничного трения

1.1.1. Аппарат поверхностных сил

В настоящее время для экспериментального исследования статических и динамических свойств молекулярно тонких жидкостей, зажатых между двумя атомарно-гладкими поверхностями, широко используется аппарат поверхностных сил (в англоязычной терминологии Surface Forces Apparatus – SFA), устройство которого было предложено Тейбором и Винтертоном [83], а затем Израелашвили и Тейбором [84]. Причем изначально SFA использовался для измерения Ван-дер-Ваальсовых сил, возникающих между двумя слюдяными поверхностями, как функций расстояния между ними в воздухе и вакууме. Позже Израелашвили и Адамс [85] разработали более совершенный аппарат для измерения нормальных сил между двумя поверхностями, погруженными в жидкость, причем толщина слоя жидкости между поверхностями в этой модификации приближалась к размеру молекул жидкости. Далее SFA претерпел ряд существенных изменений, что позволило с его помощью измерять параметры смазочного слоя при динамическом сдвиге поверхностей трения, которые представляют собой атомарно-гладкие оптически прозрачные поверхности слюды [86]. Отметим, что трущиеся поверхности должны быть прозрачными, поскольку динамические параметры смазочного слоя измеряются при помощи оптического интерференционного метода. Далее был предложен ряд модификаций SFA, что позволило использовать его для измерения толщины смазочных слоев, динамических вязких и упругих напряжений в слое, силы трения и нормальной силы, проводить исследования при влиянии внешней осциллирующей силы, и т.д. Подробное описание SFA приведено в обзоре [87], однако и на сегодняшний день SFA эволю-

ционирует, в основном благодаря научной группе Израелашвили. В частности, в работе [88] на основе SFA проведено исследование прерывистого режима движения и его влияние на разрушение суставов в биологических организмах. Отметим, что в SFA для исследований различных трибологических явлений и процессов в настоящее время разработан большой набор узлов трения, содержащих сдвиговые поверхности [89]. Схема одной из современных модификаций SFA приведена на рис. 1.1. Показанная модификация используется для измерения адгезии и сил взаимодействия между двумя изогнутыми атомарно-гладкими поверхностями, погруженными в жидкость, либо находящимися в среде пара [14, 85, 89, 90]. Расстояние между поверхностями измеряют с помощью интерференционных методов с точностью до $\pm 0,1$ нм. По форме интерференционных полос также можно определить радиус поверхностей R и любую деформацию поверхностей, которая возникает в результате их взаимодействия [91–93]. Разрешение в поперечном направлении составляет порядка 1 мкм. Расстояние между поверхностями устанавливается с точностью до 0,1 нм, а чувствительность нормальной силы составляет около 10^{-8} Н. Для типичного радиуса поверхности $R \approx 1$ см значения поверхностной энергии γ могут измеряться с точностью около 10^{-6} Дж/м², где энергия взаимодействия двух поверхностей радиусами R_1 и R_2 определяется по формуле

$$\gamma = \frac{F_s}{3\pi} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (1.1)$$

где F_s — сила, которую необходимо приложить для разделения поверхностей. Ее легко определить по формуле

$$F_s = K_s \Delta h, \quad (1.2)$$

где K_s — жесткость тянущей пружины, а Δh — натяжение пружины, которое измеряется как равновесное расстояние между поверхностями после их разделения.

В SFA в качестве взаимодействующих поверхностей используются различные материалы. Это может быть слюда [85, 94, 95], диоксид кремния [96], сапфир [97], а также полимерные слои [98]. Указанные материалы также используются как

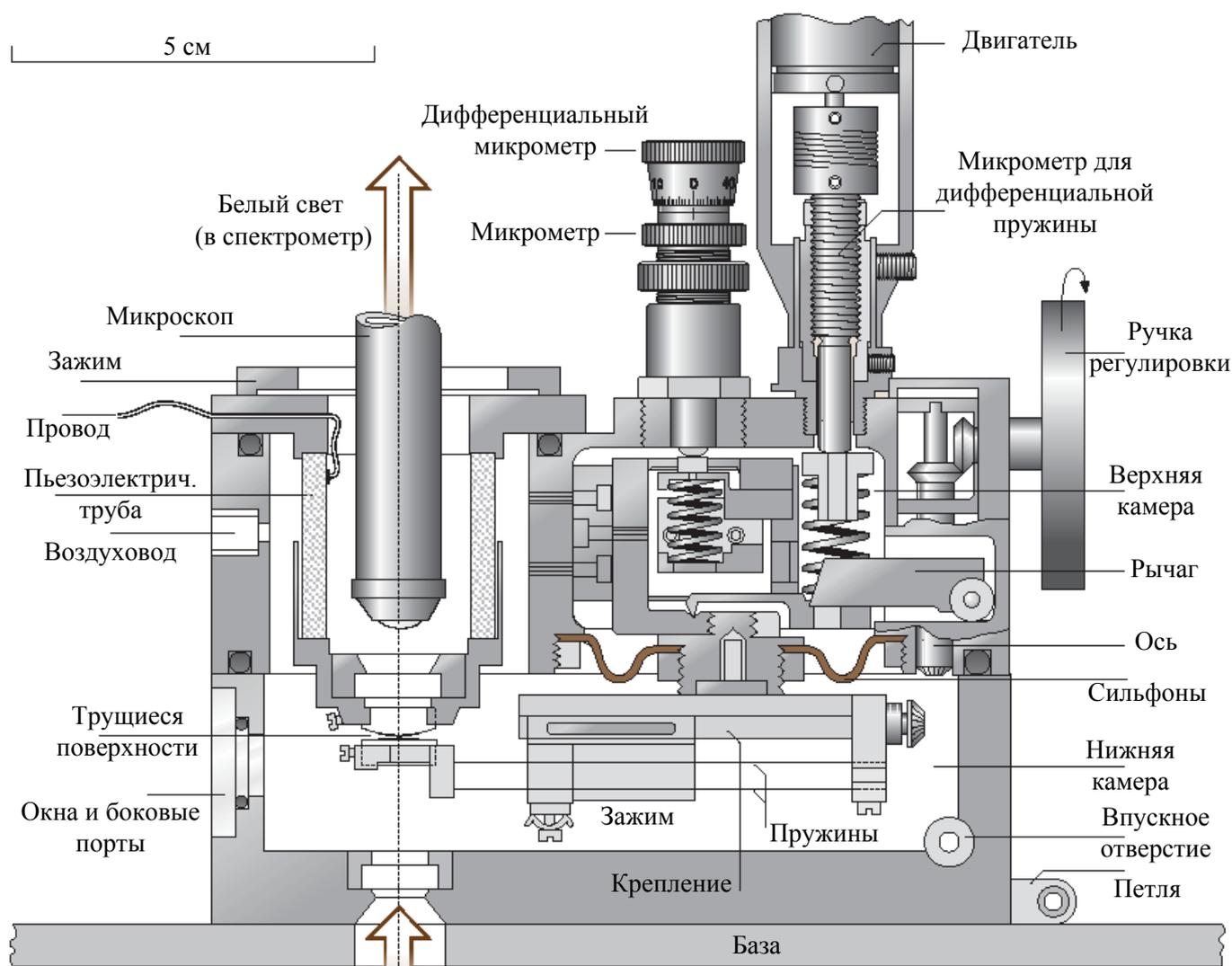


Рис. 1.1. Схематическое изображение аппарата поверхностных сил SFA Mk III, который используется для измерения сил взаимодействия между двумя контактирующими поверхностями, разделенными ультратонким смазочным слоем [89]. Здесь межмолекулярные силы между двумя макроскопическими цилиндрическими поверхностями локального радиуса R могут быть определены как функции расстояния между поверхностями, разделенными слоем жидкости толщиной от десятых нанометра до микрометра. При применении различных устройств для перемещения трущихся поверхностей SFA позволяет проводить измерения сил трения при различных скоростях скольжения и расстояниях между поверхностями (толщина смазочного материала).

основа для нанесения слоев в экспериментах по исследованию сил взаимодействия между адсорбированными или химически связанными полимерными слоями [99], поверхностно-активными веществами и липидными монослоями и бислоями [100, 101], металлическими и металлоксидными слоями [102]. Диапазон жидкостей и паров, которые могут быть использованы в роли материала, разграничивающего поверхности, практически неограничен. Здесь используются водные растворы, органические жидкости и растворители, полимерные расплавы, различные нефтяные масла и жидкие смазочные материалы, жидкие кристаллы [103], металлические монослои, и т.д.

Использование различных узлов трения в SFA позволяет измерять силу трения, возникающую между двумя контактирующими поверхностями, движущимися друг относительно друга при различных значениях скоростей сдвига и частоты периодического воздействия. Причем одновременно измеряются нормальная (нагрузка) и тангенциальная (сила трения) силы. Диапазоны сил трения и скоростей скольжения, которые могут быть измерены с помощью SFA, составляют $10^{-7} \div 10^{-1}$ Н и $10^{-13} \div 10^{-2}$ м/с, соответственно. Причем непосредственно во время измерений можно изменять внешнюю нагрузку на трущиеся поверхности, как положительную, так и отрицательную. В режиме реального времени отслеживаются такие параметры, как расстояние между поверхностями h , истинная молекулярная площадь контакта A , а также упругие деформации взаимодействующих поверхностей.

Отметим, что большинство трибологических систем и экспериментов может быть описано с использованием простых механических аналогов с определенными характеристиками [104]. Сила трения F_0 , генерирующаяся на поверхности, как правило, определяется как сила F в другом месте установки. Механическое соединение между ними может быть описано в терминах упругой жесткости K , или с использованием более сложных неупругих коэффициентов, в зависимости от типа системы [105]. Различие между силами F и F_0 важно, поскольку почти во всех практических ситуациях измеренная сила F отличается от реальной внутренней силы F_0 , которая генерируется непосредственно на поверхности. Отметим, что

системы, работающие в режиме граничного трения, также активно изучаются с применением методов атомной силовой микроскопии [106].

1.1.2. Прерывистый режим трения и классические модели его описания

Одной из отличительных особенностей граничного трения [107, 108] является наличие прерывистого (*stick-slip*) режима трения в широком диапазоне параметров, когда сила трения скачкообразно изменяется в процессе движения [12, 109, 110]. Такое поведение присуще также и системам, работающим в режиме сухого трения. Отметим, что прерывистый (*stick-slip*) режим трения наблюдался Боуденом и Тейбором более 60 лет назад [111] при проведении экспериментов по определению влияния молекулярного веса полимеров на коэффициент трения. В прерывистом режиме движения скорость скольжения периодически изменяется со временем, поскольку периоды проскальзывания чередуются с периодами ”прилипания“ контактирующих поверхностей. Хотя прошло уже более 60-ти лет, до сих пор не существует единого подхода, который описывал бы все особенности прерывистого режима. Одной из задач предлагаемой диссертационной работы является выяснение механизмов прерывистого движения в режиме граничного трения двух атомарно–гладких твердых поверхностей при наличии ультратонкого слоя смазочного материала между ними, без учета протекания физико–химических процессов. Поэтому остановимся на этом вопросе более подробно.

В данном подразделе рассмотрим три различных подхода для описания прерывистого режима трения, где механическое соединение может быть представлено простым упругим телом типа линейной пружины [112].

Модель шероховатых поверхностей. В случае наличия шероховатостей внезапное проскальзывание поверхностей может произойти, когда создается неустойчивость за счет того, что все неровности верхней поверхности находятся выше неровностей нижней. Величина проскальзывания в этом случае зави-

сит от высоты неровностей и склонов, от скорости скольжения, а также от упругой податливости поверхностей. Как и во всех случаях наблюдения прерывистого движения, скорость движения свободного конца пружины V_0 , с помощью которой прикладывается сила к движущейся поверхности, может быть постоянной. При этом относительная скорость движения поверхностей V будет флуктуировать во времени. Такой тип прерывистого движения был описан Рабиновичем [112]. В рассматриваемом случае флуктуации скорости V наблюдаются из-за наличия поверхностных дефектов и неровностей, а не из-за внутреннего взаимодействия между двумя поверхностями. Если рассматривать относительно гладкие отшлифованные поверхности, то наличие периодического потенциала на атомном уровне может привести к периодическому прерывистому движению. На рис. 1.2 схематически представлена описанная ситуация. На рисунке можно вы-

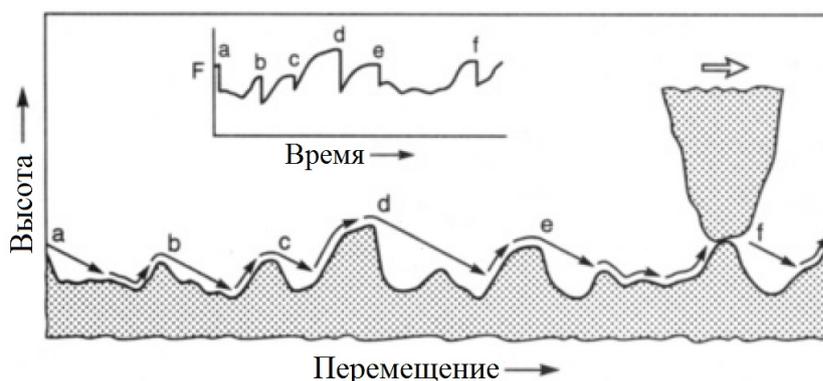


Рис. 1.2. Схематическое изображение модели Рабиновича [112] для шероховатых поверхностей, где показан механизм возникновения нерегулярного прерывистого движения (вставка к рисунку) в случае, когда упругая жесткость системы (отражается на склонах линий проскальзывания) не слишком высока.

делить несколько ситуаций. Например, после преодоления системой точки d наблюдается быстрое проскальзывание, что приводит к резкому уменьшению силы трения, показанной на вставке к рисунку, а после точки e реализуется медленное движение, что соответствует режиму скольжения. Таким образом, рельефом поверхностей можно объяснить наблюдаемое поведение. Это одна из классических моделей, которая однако не в состоянии описать причины возникновения прерывистого режима в случае трения между атомарно-гладкими твердыми поверхностями.

Модель зависимости от расстояния (модель ползучести). Другой подход к описанию прерывистого режима движения может быть применен для описания такового при трении поверхностей двух твердых тел. Здесь вводятся в рассмотрение характерное расстояние l и характерное время τ , требуемое для увеличения прочности сцепления двух неровностей после их вступления в контакт. Этот первоначально предложенный Рабиновичем [112] подход предполагает, что две шероховатые макроскопические поверхности находятся в контакте благодаря наличию микроскопических неровностей с характерной длиной l . Во время сдвига каждая поверхность сначала должна преодолеть это расстояние (размер контактирующих узлов), после чего поверхности продолжают скользить, но с более низкой (кинетической) силой трения, чем изначальное (статическое) трение. Причиной снижения силы трения является то, что хотя в среднем новые сцепления между неровностями должны сформироваться так же быстро, как разорваться старые, зависимость от времени адгезии и трения между новыми неровностями всегда ниже, чем между старыми, контакт между которыми существовал более длительное время до начала движения.

Таким образом, сила трения имеет высокое значение на стадии ползучести скольжения, а когда поверхности преодолевают характерное расстояние, трение резко падает до кинетического значения. Для любой системы, в которой кинетическое трение меньше статической силы трения (или когда реализуется отрицательный наклон на зависимости силы трения от скорости) будет существовать устойчивое прерывистое движение в определенном диапазоне значений жесткости, массы и скорости движущегося блока. Такой тип движения наблюдается в различных системах сухого трения (в отсутствии смазки), таких как бумага на бумаге [113, 114], сталь на стали [115–117]. В то время как изначальная модель описывает схватывание макроскопических неровностей, она также может быть применена для описания поведения атомарно-гладких поверхностей. Например, для жидких полимерных смазок в роли характерной длины будет выступать запутанность полимерных цепочек, которая в условиях ограниченной геометрии может быть значительно больше, чем в объемных системах.

Модель зависимости от скорости. В отличие от двух других моделей, упомянутых выше, которые применяются в основном для описания контактного взаимодействия и трения твердых поверхностей в отсутствии смазочного материала, рассматриваемая модель описывает поведение поверхностей при наличии между ними тонкого слоя смазочного материала. Модель трения, учитывающая зависимость от скорости, является наиболее изученным механизмом прерывистого движения. Если сила трения уменьшается с увеличением скорости скольжения, как это происходит в режиме граничного трения за счет сдвигового разжижения при использовании псевдопластических неньютоновских смазок, движущая сила F_s , необходимая для инициирования движения, всегда будет выше, чем кинетическая сила F_k , необходимая для его поддержания.

Убывание величины внутреннего трения F_0 с ростом скорости сдвига V приводит к установлению режима скольжения при наличии периодической составляющей в зависимости силы трения от времени, где во время каждого цикла наблюдается быстрое ускорение с последующим торможением. Такой режим наблюдается при движении движущего привода с фиксированной скоростью V_0 . Причем частота и амплитуда переходов ускорение/торможение зависит не только от функции $F_0(V)$, но и от жесткости K движущей пружины и массы m движущегося трущегося блока, а также от стартовых условий в момент времени $t = 0$, соответствующий началу движения.

Закон движения трущейся поверхности может быть определен при решении дифференциального уравнения типа

$$m\ddot{x} + (V_0t - x)K - F_0 = 0, \quad (1.3)$$

где x — координата движущейся поверхности, $F_0 = F_0(x, V, t)$ — сила трения между трущимися поверхностями, а величина $(V_0t - x)K$ — движущая сила (сила натяжения движущей пружины, свободный конец которой сдвигается с постоянной скоростью V_0). Для полного решения уравнения (1.3) необходим набор начальных условий в момент времени начала движения $t = 0$. Уравнение (1.3) описывает простую механическую систему, и здесь поведение будет задаваться зави-

симостью силы трения $F_0(x, V, t)$. Существует множество феноменологических моделей, задающих указанную зависимость, и позволяющих описать различные типы прерывистого движения и экспериментально наблюдаемые эффекты. Эти модели, как правило, задают зависимость силы трения от скорости $F_0 = F_0(V)$, и могут содержать ряд механически соединенных элементов [118, 119]. Один из простейших подходов, в котором реализуются два значения силы трения: статическое трение F_s и кинетическое $F_k < F_s$, являющийся упрощенным аналогом теории фазовых переходов, описан выше. Более сложная теория, учитывающая упругие свойства поверхностей трения и позволяющая проследить богатый спектр зависимостей $F(V)$, была предложена доктором Бо Перссоном [120]. В более поздних работах [121, 122] разработан подход, основывающийся на теории фазовых переходов Ландау второго рода, позволяющий изучить зависимости силы трения вида $F_0(V, T)$, где T — температура смазочного материала. Однако, несмотря на то, что на сегодняшний день накоплено огромное количество подробных экспериментальных результатов, до сих пор не существует единой теории, которая описывала бы процессы, происходящие в режиме граничного трения. А существующие подходы не дают ответа на основной вопрос о происхождении сил трения. Настоящая диссертационная работа в достаточной мере заполняет этот пробел для систем, работающих в режиме граничного трения.

В работе [123] проведено экспериментальное изучение зависимости силы трения от скорости в пределах отдельного цикла прерывистого движения. В случае макроскопического гранулированного материала, заключенного между двумя твердыми поверхностями, показано ослабление трения в начале скольжения с увеличением скорости. Тем не менее, реализуется петля гистерезиса на зависимости $F(V)$ с различным поведением при замедлении движения и проскальзывании. Аналогичные результаты были получены для смазочных слоев толщиной от 1 до 2 нм, которые помещались между слюдяными поверхностями [124]. Указанные работы показывают, что для описания наблюдаемых особенностей одной зависимости силы трения от скорости недостаточно и дополнительно необходимо рассматривать фазовые состояния граничной смазки.

1.1.3. Модель фазовых переходов

С помощью методов молекулярной динамики было обнаружено, что ограниченные твердыми поверхностями ультратонкие слои смазочных материалов показывают фазовые переходы первого рода между твердым и жидким состояниями [125, 126]. В связи с этим было высказано предположение, что такие переходы и являются причиной прерывистого режима движения, наблюдаемого экспериментально для простых изотропных жидкостей, зажатых между двумя кристаллическими телами. Из этой интерпретации следует, что прерывистый режим возникает из-за резкого изменения свойств смазочного слоя при переходе [127, 128], а не при постепенном или непрерывном изменении, как в классической модели "зависимости от скорости". Другие компьютерные модели показывают, что в прерывистом режиме движения реализуется "плавление сдвигом", когда при превышении сдвиговыми напряжениями критического значения происходит разупорядочение смазочного материала [13, 129, 130].

Схематическое изображение модели фазовых переходов показано на рис. 1.3. Здесь показана ситуация, когда смазочный материал периодически затвердевает

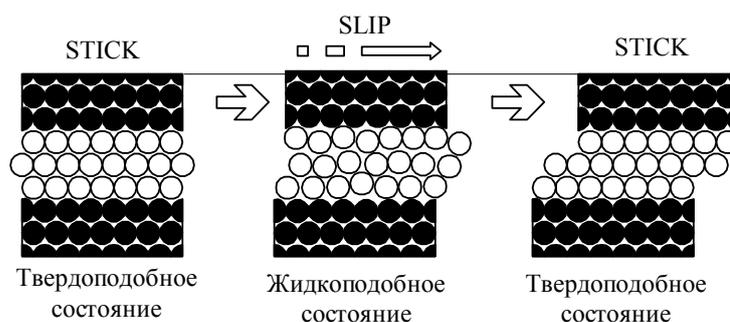


Рис. 1.3. Схематическое изображение модели "фазовых переходов" [12] для 22 сферических молекул, заключенных между двумя кристаллическими поверхностями.

и плавится, что в итоге приводит к прерывистому режиму движения. В отличие от модели зависимости от скорости, здесь внутренняя сила трения изменяется резко (во время фазовых переходов), а не непрерывно. Итоговая зависимость силы трения от времени $F(t)$ в этом случае также имеет определенные отличия, например, пики на зависимости $F(t)$ более острые и прерывистый режим исчезает,

когда скорость сдвига превышает определенное критическое значение V_c . Стоит отметить, что на рисунке смещение показано для двух периодов решетки, в то время как в большинстве практических ситуаций этот период намного больше, а фазовые переходы между структурными состояниями таких ультратонких слоев не могут быть такими же, как переходы в гранулированных средах или объемных жидкостях, поскольку в рассматриваемой ситуации на симметрию состояния существенное влияние оказывают поверхности трения, которые при плавлении смазочного слоя остаются твердыми. Поэтому состояния смазочного материала не являются устойчивыми термодинамическими фазами, а представляют кинетические режимы трения, которых может быть несколько. В связи с этим говорят не об истинных твердых и жидких фазах, а о твердоподобном и жидкоподобном состояниях, переходы между которыми и являются причиной возникновения прерывистого режима движения. Стоит отметить, что в расплавленном состоянии объем смазочного материала увеличивается, что приводит к приподнятию верхнего блока. Этот факт наблюдается экспериментально, и в экспериментах по расстоянию между трущимися поверхностями судят о фазовом состоянии смазки.

Интерпретация хорошо известного явления снижения коэффициента трения с увеличением скорости скольжения была предложена Томпсоном и Роббинсоном в работе [125], основываясь на результатах компьютерного моделирования. Объяснение этого эффекта строится на постулате, что не трение изменяется с изменением скорости скольжения V , а изменяются временные промежутки, в которых смазка находится в твердоподобном и жидкоподобном состояниях, что соответствует режимам прилипания и скольжения. Другими словами, в любой момент во время скольжения, трение в любой локальной области всегда равно F_s или F_k , что соответствует статическому и кинетическому значениям. Результирующая сила трения является суммой всех таких дискретных величин, усредненной по площади контакта A . Поскольку с увеличением скорости сдвига V каждая локальная область проводит больше времени в режиме скольжения (F_k) и меньше в режиме статического трения (F_s), то в результате общий коэффициент трения уменьшается. Основываясь на такой интерпретации Карлсон и Батиста постро-

или феноменологическую модель [131], в которой и использовали зависимость силы трения от скорости и фазового состояния смазочного материала. Указанная модель объясняет и предсказывает многие экспериментально наблюдаемые эффекты.

Отметим, что в настоящее время существует большое количество экспериментальных работ, в которых с помощью SFA, AFM и других методик изучаются различные аспекты граничного трения для большого количества типов контактирующих поверхностей, смазочных материалов, различных значений внешней нагрузки на поверхности, скоростей сдвига и иных условий эксперимента. Эти работы показывают наличие принципиально новых эффектов, которые не присущи объемным смазкам и до появления высокоточного оборудования типа SFA считались артефактами эксперимента. Опишем в следующих подразделах литературного обзора некоторые из наблюдаемых эффектов.

1.1.4. Зависимость силы трения от скорости

На рис. 1.4 показано точное воспроизведение экспериментально определенной зависимости силы трения от времени [12] при последовательном увеличении скорости скольжения V . Видно, что с увеличением скорости скольжения возрастает

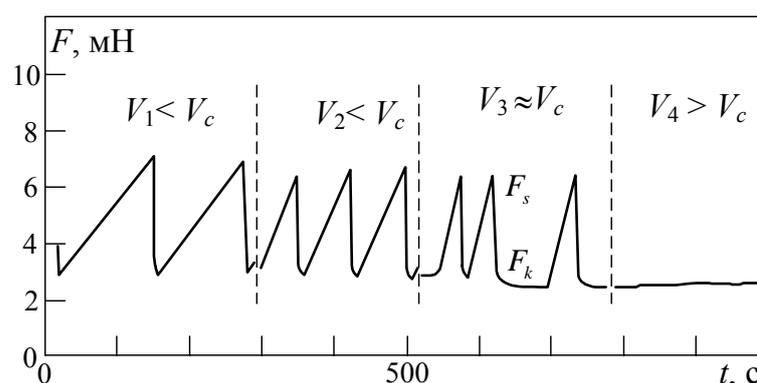


Рис. 1.4. Зависимость силы трения $F(t)$ для гексадекана, при увеличении скорости скольжения $V_{1-4} = 0,08; 0,18; 0,29; 0,4$ мкм/с [12].

частота фазовых переходов плавление/затвердевание, а также уменьшается величина максимальной статической силы трения F_s . При приближении к критическому значению скорости $V \approx V_c$ прерывистый режим становится неустойчивым,

а на зависимости появляются длинные кинетические участки $F = F_k$, что приводит к уменьшению частоты фазовых переходов. При превышении скоростью критического значения $V > V_c$ наступает полное плавление смазочного материала, что соответствует режиму скольжения со значением кинетической силы трения $F = F_k = \text{const}$. Отметим, что зависимость, показанная на рис. 1.4, получена при температуре $T = 17^\circ\text{C}$, что меньше температуры плавления гексадекана, которая составляет $18,15^\circ\text{C}$. Таким образом, в рассматриваемом случае имеем дело с плавлением сдвигом [130], осуществляющимся согласно механизму, описываемому в рамках рассматриваемой в этом подразделе модели фазовых переходов.

Исследования показали, что в случае использования как поверхностей трения поверхностно активных веществ, возможно проявление прерывистого трения между двумя кинетическими состояниями с высоким и низким трением, когда с увеличением скорости осуществляется переход от плавного скольжения к прерывистому режиму. На рис. 1.5 показана такая ситуация, где при превышении скоростью критического значения осуществляются периодические переходы между режимами трения со статическим F_s и кинетическим F_k трением. Переход

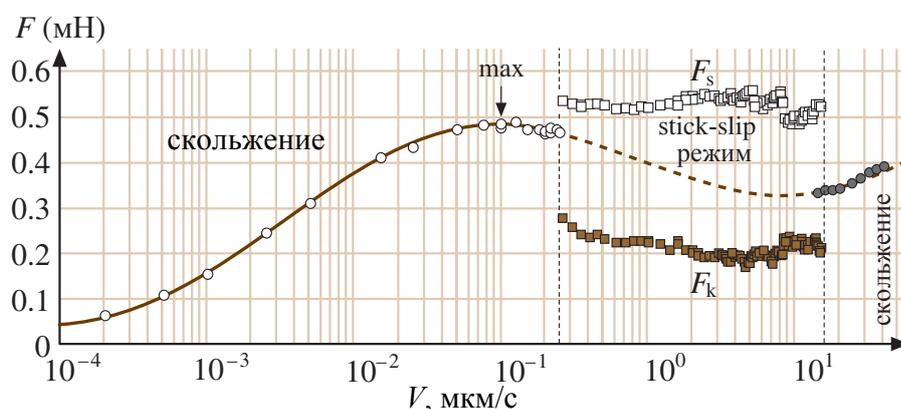


Рис. 1.5. Зависимость силы трения от скорости сдвига в эксперименте во время сдвига двух адсорбированных монослоев поверхностно активных веществ в водном растворе при внешней нагрузке $L = 4,5$ мН и температуре $T = 20^\circ\text{C}$ [132].

от режима скольжения (показан пустыми кружками на рисунке) к прерывистому режиму трения (квадратики) происходит при скорости $V \approx 0,3$ мкм/с. После последующего повышения скорости при ее значении от 14 до 17 мкм/с снова наблюдается переход к режиму скольжения (закрашенные кружки). В этом слу-

чае прерывистый режим реализуется для ограниченного с двух сторон диапазона скоростей сдвига. Отметим, что на этот диапазон сильно влияет нагрузка на трущиеся поверхности L , а также их температура T .

1.1.5. Зависимость силы трения от внешней нагрузки и температуры

На рис. 1.6 показана временная зависимость силы трения, измеренная с помощью SFA, при последовательном увеличении нагрузки на поверхности. Из ри-

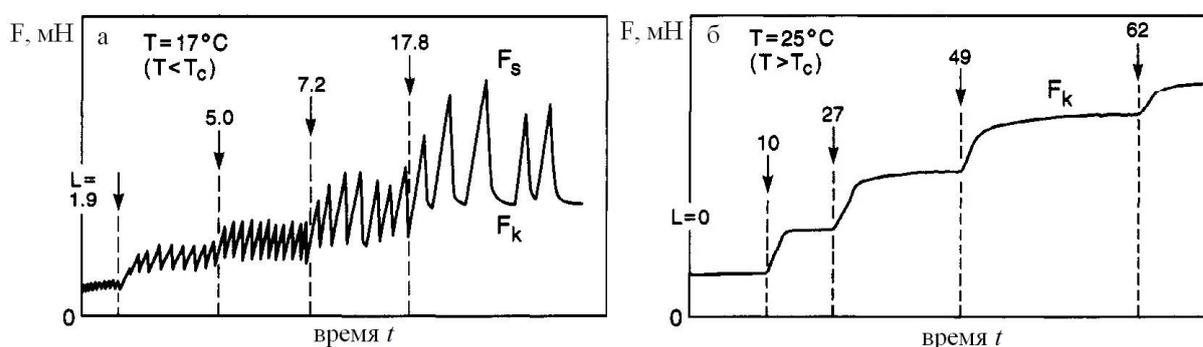


Рис. 1.6. Сила трения F как функция времени t при увеличении внешней нагрузки на поверхности L (в величинах мН, показанных стрелками) для двух слюдяных поверхностей, разделенных ультратонким слоем гексадекана толщиной 12 \AA при движении привода с постоянной скоростью $V_0 = 0,4 \text{ мкм/с}$: (а) при температуре $T = 17^\circ\text{C}$ ($T < T_c$); (б) при температуре $T = 25^\circ\text{C}$ ($T > T_c$) [12].

сунка следует, что внешняя нагрузка оказывает нетривиальное влияние на устанавливающийся режим. Так, на рис. 1.6а видно, что рост нагрузки может приводить как к увеличению частоты фазовых переходов, так и к ее уменьшению. А при превышении критического значения нагрузки на зависимости $F(t)$ появляются длинные кинетические участки $F = F_k$, соответствующие режиму скольжения. Однако во всех случаях, приведенных на рисунке, с ростом нагрузки сила трения увеличивается. Рис. 1.6б получен при температуре, превышающей критическое значение T_c , поэтому при всех выбранных значениях L реализуется кинетический режим скольжения с постоянной стационарной силой трения F_k . В этом эксперименте температура плавления слоя гексадекана оказалась приблизительно равной $T_c \approx 25^\circ\text{C}$, что на 7°C превышает температуру плавления объемного гексадекана. Также стоит отметить, что в рассматриваемом случае критическая тем-

пература слабо зависит от нагрузки L и скорости скольжения V . Тем не менее, многочисленные эксперименты показывают, что T_c сильно зависит от количества молекулярных слоев между поверхностями и угла, под которым смещаются контактирующие через смазку слюдяные поверхности.

Из рис. 1.6 следует, что при фиксированной температуре T и внешней нагрузке L в системе устанавливаются постоянные значения статической F_s и кинетической F_k сил трения. Таким образом, указанные величины являются функциями нагрузки и температуры. Поскольку рассматриваемые

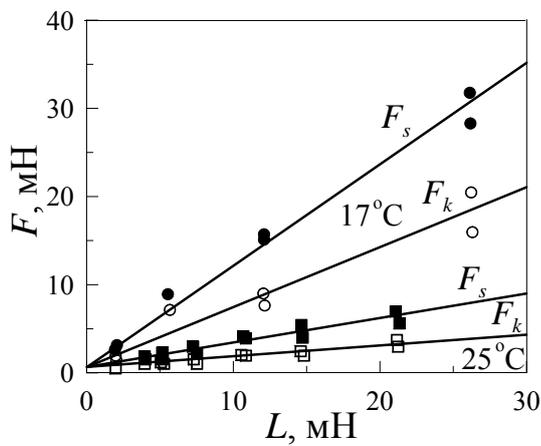


Рис. 1.7. Статическая F_s и динамическая F_k сила трения как функция внешней нагрузки L для слоя гексадекана при скорости внешнего привода $V_0 = 0,4$ мкм/с при температурах $T = 17^\circ\text{C}$ и 25°C [12].

системы работают в широком диапазоне довольно высоких значений внешних нагрузений, исследование влияния нагрузки на поведение трибологической системы представляет повышенный интерес. Большие давления в зоне контакта обусловлены тем, что размер контакта составляет порядка $3 \cdot 10^{-9}$ м². С другой стороны, для обеспечения толщины смазочного слоя в несколько атомарных диаметров "лишнюю" смазку нужно выдавливать из под поверхностей, для чего также требуются большие значения давлений. Тем более, как это видно на рис. 1.6, внешнее давление влияет на режим трения нетривиальным образом. На рис. 1.7 дополнительно показаны экспериментально измеренные зависимости величин F_s и F_k от нагрузки при двух фиксированных значениях температуры T . Из рисунка следует, что с увеличением нагрузки силы F_s и F_k увеличиваются линейным образом, а с ростом температуры указанные значения снижаются. Учитывая линейный рост силы трения с нагрузкой можно вести понятие статического $\mu_s = dF_s/dL$ и динамического $\mu_k = dF_k/dL$ коэффициентов трения, которые для температуры $T = 17^\circ\text{C}$ составляют $\mu_s = 1,14$ и $\mu_k = 0,68$. Для значения температуры $T = 25^\circ\text{C}$ эти коэффициенты снижаются и принимают значения $\mu_s = 0,26$, $\mu_k = 0,12$.

1.1.6. Влияние формы молекул смазочного материала

На режим трения существенно влияет как тип поверхностей трения, так и вид используемого смазочного материала. Так, на рис. 1.8а показаны эксперимен-

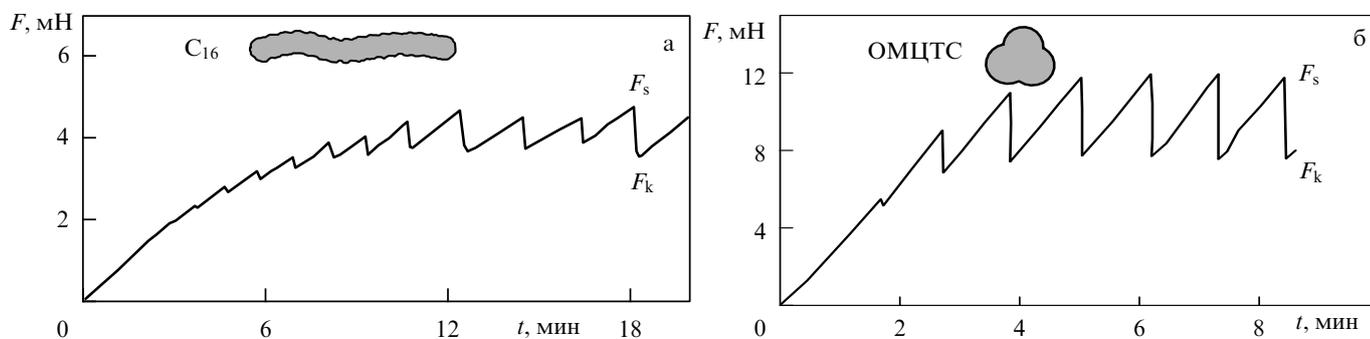


Рис. 1.8. Зависимости силы трения от времени $F(t)$: (а) смазочный слой состоит из цепных молекул гексадекана (аналогичное поведение наблюдается для тетрадекана и изооктадекана); (б) смазочный слой состоит из квазисферических молекул ОМЦТС (октаметилциклотетрасилоксан) [12].

тальные зависимости, полученные для гексадекана $C_{16}H_{34}$, молекулы которого имеют длину около 20 \AA и ширину в 4 \AA . На рис. 1.8б показаны аналогичные результаты для квазисферических молекул ОМЦТС $C_8H_{24}O_4Si_4$, которые имеют размер порядка 8 \AA . Рис. 1.8 получен с помощью SFA для толщины смазочного материала около 10 \AA . На рисунке движение с постоянной скоростью V начинается в момент времени $t = 0$. Перед началом движения поверхности сближаются на расстояние $h \approx 10 \text{ \AA}$, а слой гексадекана при этом упорядочивается. Как следует из рисунка, сила трения постепенно увеличивается, пока не наступит стационарный режим, до установления которого амплитуда *stick-slip* пиков на зависимости $F(t)$ также возрастает. Для сравнения, рис. 1.8б показывает типичное поведение для квазисферических молекул в роли смазочного материала при условиях, аналогичных рис. 1.8а. Результаты рис. 1.8 показывают, что в случае использования цепных молекул для их упорядочения при сдвиге требуется большее время, чем для квазисферических. Также приведенные результаты подтверждают то, что молекулярная структура в статическом случае при нулевой скорости движения существенно отличается от структуры смазочного материала в динамическом случае при движении с фиксированной скоростью $V \neq 0$. Тем не ме-

нее, судя по небольшому различию между статическим значением силы трения F_s и ее кинетическим значением F_k во время движения можно сделать вывод, что осуществляются переходы между двумя кинетическими структурными состояниями, а не между истинными жидкой и твердой фазами, в случае чего эта разница естественно была бы намного больше.

Рис. 1.8 показывает также, что для обоих рассматриваемых случаев для установления стационарного состояния требуется довольно большое время, порядка нескольких минут, что на 10 порядков больше, чем время, которое можно было бы ожидать для этих жидкостей, основываясь на их вязкости или скорости диффузии в объемных смазках. Это происходит за счет того, что времена релаксации для зажатых между двумя поверхностями молекул могут быть больше на 10 порядков величины, чем в обычном объемном случае либо в случае смазочных пленок, которые всего лишь на несколько ангстрем толще. Помимо этого при процессах упорядочения в тонких пленках наблюдаются пространственные корреляции на больших расстояниях, что позволяет ввести в рассмотрение модуль сдвига системы как целого.

1.1.7. Эффекты памяти

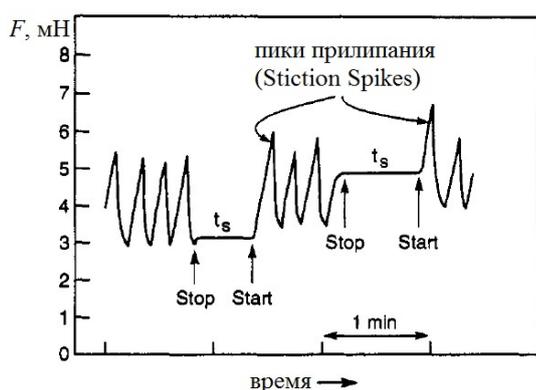


Рис. 1.9. Зависимость $F(t)$, где стационарный режим устанавливается сразу после остановки длительностью t_s [12].

Очень большие времена релаксации, наблюдаемые для тонких пленок смазочных материалов, порождают определенный тип "эффектов памяти", которые могут быть исследованы при проведении так называемых "stop-start" экспериментов [133]. Если скольжение остановить на время t_s , а затем возобновить движение в том же направлении и с той же скоростью, то время, необходимое для установления стационарного состояния, будет зависеть

от того, как много информации о состоянии системы потеряно за время остановки. Это позволяет произвести измерения "памяти" системы после остановки. В некоторых случаях стационарный режим начинается сразу же после возобновления движения, как это показано на рис. 1.9 для пленки гексадекана. На рисунке показана ситуация, в которой после внезапной остановки движущего привода поверхности останавливаются и остаются в статическом контакте без наблюдаемой релаксации в смазочном слое (показано горизонтальными участками $F(t) = \text{const}$). Когда привод снова начинает движение в том же самом направлении, наблюдается продолжение установившегося до остановки режима, с тем исключением, что высота первого пика на зависимости $F(t)$ больше, чем высота пиков силы трения в стационарном режиме. Причем чем больше время остановки t_s , тем больше амплитуда первого пика, который часто называют пиком прилипания (*stiction spike*).

Подобное короткое время для установления стационарного режима движения необходимо также в случае изменения направления движения, что показано на рис. 1.10а для слоя гексадекана. Здесь при изменении направления дви-

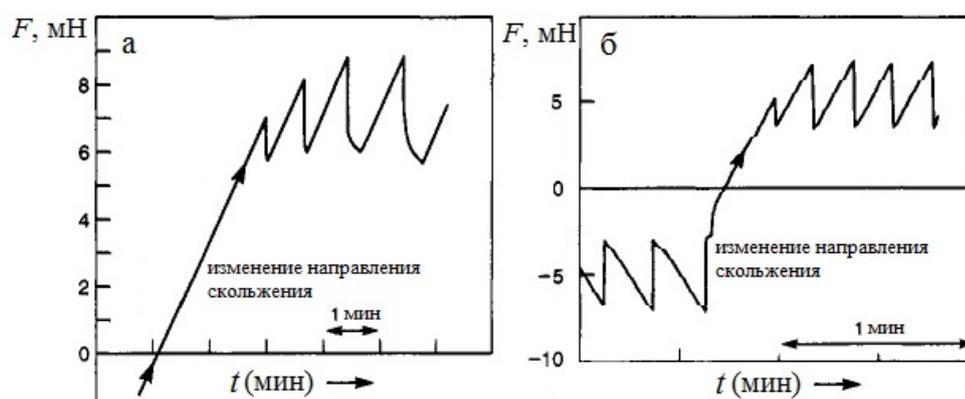


Рис. 1.10. Зависимости силы трения от времени $F(t)$, на которой показано установление стационарного режима после изменения направления движения [12].

жения движущего привода поверхности мгновенно останавливаются и остаются в состоянии покоя, пока сила трения снова не достигнет величины F_s , после чего возобновляется скольжение в обратном направлении. Этот период покоя показан на зависимостях прямой линией с постоянным наклоном, поскольку длина движущей пружины, с помощью которой измеряется сила трения, изме-

няется непрерывно, причем натяжение пружины сначала уменьшается, а затем снова увеличивается. Стоит отметить, что в этом случае высота первого пика на зависимости $F(t)$ существенно ниже, чем высота последующих. Стационарное движение после смены направления движения на рис. 1.10 устанавливается после двух пиков на зависимости $F(t)$. Для сравнения, рис. 1.8а, полученный при тех же условиях, показывает 7 пиков до установления стационарного состояния. На рис. 1.10б показаны зависимости, полученные для молекул ОМЦТС (ср. с рис. 1.8б).

При более внимательном рассмотрении рис. 1.9 и рис. 1.10 видно, что существуют небольшие, однако существенные различия между зависимостями $F(t)$ после остановки в зависимости от того возобновляется движения в том же, либо в противоположном направлении. Если оно возобновляется в том же направлении (рис. 1.9), первый пик на зависимости $F(t)$ выше, чем в стационарном режиме. Однако, изменение направления движения (рис. 1.10) приводит к уменьшению высоты первого пика $F(t)$. Это позволяет предположить, что после остановки молекулы смазочного материала продолжают образование еще более упорядоченной твердоподобной структуры, которая, однако, не симметрична по отношению к повороту на 180 градусов в направлении скольжения [12].

1.1.8. Неньютоновская вязкость граничных смазок и обобщенная диаграмма Герси – Штрибека

На рис. 1.11 показана классическая диаграмма Герси – Штрибека [1]. Эта диаграмма показывает, как сила жидкостного трения зависит от набора экспериментальных параметров. Эти параметры – это площадь контакта A , скорость скольжения V , объемная вязкость смазочного материала η_b , а также толщина смазочного слоя h . Последние два параметра определяют скорость деформации $\dot{\epsilon} = V/h$. На самом деле, локальная микроскопическая эффективная вязкость η_{eff} может сильно отличаться

ся от объемной вязкости η_b , поэтому на диаграмме граничный режим показан пунктиром. На диаграмме с увеличением толщины смазочного материала

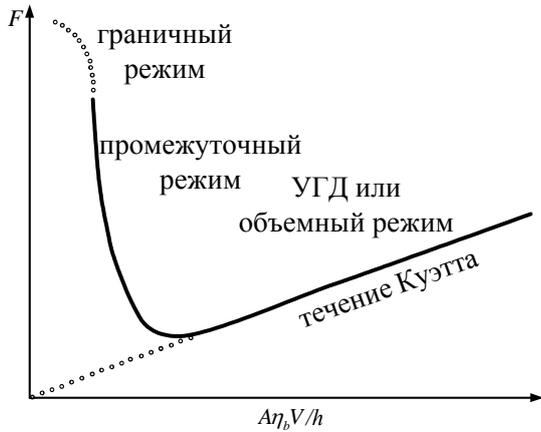


Рис. 1.11. Классическая диаграмма Герси – Штрибека.

устанавливается течение Куэтта, для которого справедливы равенства [134]

$$\begin{aligned} F &= AV\eta_b/h = A\eta_b\dot{\epsilon}, \\ \sigma &= F/A = V\eta_b/h = \eta_b\dot{\epsilon}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

где σ – сдвиговые напряжения. В случае реализации граничного режима трения сдвиговое течение смазочного материала по аналогии с формулами (1.4) может быть описано в терминах ”эффективной вязкости“:

$$\eta_{eff} = \frac{Fh}{AV}, \quad (1.5)$$

где для объемных смазок $\eta_{eff} = \eta_b$.

На рис. 1.12а показана экспериментально измеренная зависимость эффективной вязкости от скорости деформаций для слоя додекана толщиной 2,7 нм при фиксированных значениях температуры и внешнего давления. На рисунке видно, что при низких значениях $\dot{\epsilon}$ эффективная вязкость показывает ньютоновское поведение, поскольку не зависит от скорости деформаций. То же самое наблюдается и для низких значений внешней нагрузки. Но даже при этих условиях эффективная вязкость ультратонких смазок η_{eff} намного больше, чем объемная вязкость η_b для аналогичных веществ. Из рис. 1.12а видно, что с увеличением сдвиговой скорости происходит ”сдвиговое разжижение“ [108] смазочной пленки, что приводит к уменьшению сдвиговой вязкости согласно степенной зависимости

$$\eta_{eff} \propto \dot{\epsilon}^{-n}, \quad (1.6)$$

где $\eta_{eff} \gg \eta_b$. Согласно экспериментальным данным величина n лежит в диапазоне от 1/2 до 1, но чаще всего наблюдается значение $n \approx 2/3$. Существует много теоретических работ, в которых авторы исходя из различных подходов

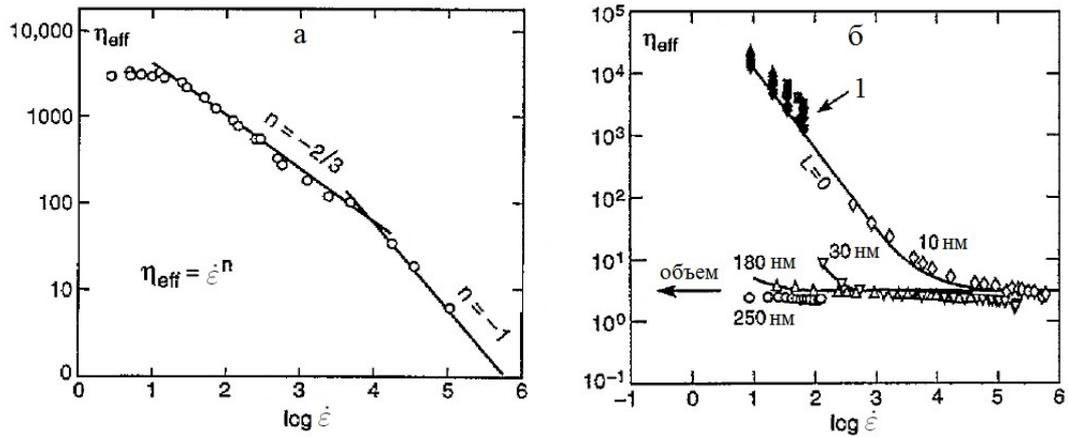


Рис. 1.12. (а) Зависимость эффективной вязкости η_{eff} (Пуаз) от скорости деформаций $\dot{\epsilon}$ (с^{-1}) для слоя додекана толщиной $h = 2,7$ нм и нормального давления $P = 0,12$ МПа при температуре $T = 28$ °С [135]; (б) Зависимость эффективной вязкости η_{eff} (Па·с) от скорости деформаций $\dot{\epsilon}$ (с^{-1}) для слоя полибутадиена с молярной массой 7000 г/моль для трех различных толщин [134].

воспроизводят это значение. В работе [136] показано, что значение n лежит в области от $2/3$ до 1, что согласуется с поведением большого количества различных систем, включая монослои поверхностно активных веществ.

На рис. 1.12б показаны результаты экспериментов по измерению зависимости эффективной вязкости η_{eff} от скорости деформации $\dot{\epsilon}$ при различных толщинах смазочной пленки h , которая представляет собой полимерный расплав. Группа точек 1 на рисунке для толщины смазочного слоя в $h = 10$ нм отвечает различным нагрузкам L (от 1 мН до 200 мН). Из рисунка следует, что ньютоновское поведение наблюдается не только при малых, но и при больших значениях величины $\dot{\epsilon}$. Также стоит отметить, что эффективная вязкость здесь является функцией не только градиента скорости, а также сильно зависит от толщины смазочного слоя.

Основываясь на экспериментах с различными поверхностями трения и смазочными материалами, авторы работы [134] предложили обобщенные на граничный режим карты трения, показанные на рис. 1.13. Отметим, что значения на осях на этих зависимостях представляют произвольные единицы и приведены с целью показать широкий диапазон величин. Обе зависимости показаны в двойных логарифмических осях. Рис. 1.13 описывает эффекты, наблюдаемые при малых и

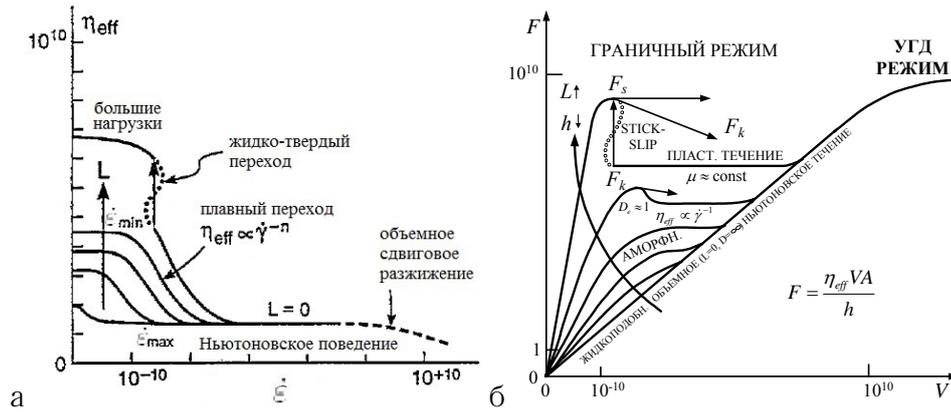


Рис. 1.13. Предложенные в работе [134] обобщенные карты трения для граничного режима: (а) зависимость эффективной вязкости от скорости деформаций $\eta_{eff}(\dot{\epsilon})$; (б) зависимость силы трения от скорости сдвига $F(V)$.

больших скоростях деформирования, которые представлены на рис. 1.12. Здесь можно выделить три различных характера поведения рассматриваемых трибологических систем:

1) Тонкие смазочные слои; упругогидродинамическое (УГД) скольжение. При нулевой нагрузке ($L = 0$) вязкость η_{eff} не зависит от скорости деформаций $\dot{\epsilon}$, за исключением больших значений $\dot{\epsilon}$, при которых наблюдается эффект сдвигового разжижения.

2) Режим граничной смазки, либо промежуточный режим. Здесь для малых нагрузений L и скоростей $\dot{\epsilon}$ наблюдается ньютоновское поведение ($\eta_{eff} = const$), однако в таком режиме эффективная вязкость намного больше ее обычного объемного значения $\eta_{eff} \gg \eta_b$. При превышении скоростью деформаций критической величины $\dot{\epsilon}_{min}$ система переходит в режим, в котором эффективная вязкость убывает согласно степенной зависимости (1.6). При дальнейшем увеличении параметра $\dot{\epsilon}$ при выполнении условия $\dot{\epsilon} > \dot{\epsilon}_{max}$ наблюдается второе плато ньютоновского поведения.

3) Граничный режим при больших нагрузениях L . Эффективная вязкость η_{eff} продолжает увеличиваться с увеличением внешнего нагружения. Причем значение $\dot{\epsilon}_{min}$, до достижения которого вязкость показывает ньютоновское поведение, с ростом нагрузки увеличивается. В случае больших нагружений переход к режиму скольжения при увеличении сдвиговой скорости не является непрерывным,

что часто приводит к реализации прерывистого (*stick-slip*) движения [12].

Основываясь на данных, представленных на рис. 1.13а, в работе [134] была получена обобщенная на граничный режим диаграмма Герси – Штрибека, показанная на рис. 1.13б и представляющая зависимость силы трения F от скорости сдвига V . На диаграмме видно, что с повышением нагрузки ньютоновское течение в УГД режиме переходит в режим граничной смазки. При больших нагрузках L и малых толщинах смазочных слоев h сила трения принимает максимальное значение F_s . При этом при увеличении скорости сдвига коэффициент трения μ остается приблизительно постоянным, другими словами кинетическая сила трения F_k не зависит от скорости сдвига V . Неньютоновское сдвиговое разжижение наблюдается при меньших нагрузках и больших толщинах слоя. Причем сила трения принимает максимальное значение, когда число Дебора $De \approx 1$ (число Дебора — это точка, в которой скорость деформации превышает естественное время релаксации в граничном смазочном слое [12, 137]).

На рис. 1.14 показана предложенная в [134] карта трения, на которой показано влияние внешней нагрузки L на режимы граничного трения. Из рисунка видно,

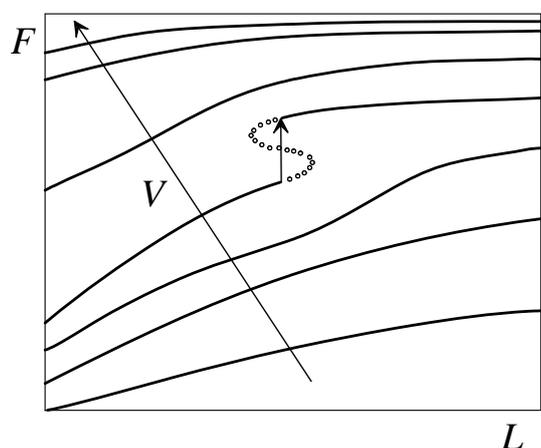


Рис. 1.14. Обобщенные экспериментальные зависимости силы трения F от приложенной нормальной нагрузки L при последовательном увеличении скорости сдвига V (направление увеличения скорости показано стрелкой вверх) [134].

что с увеличением скорости сдвига V и нагрузки L сила трения F также увеличивается. Отметим, что давление оказывает нетривиальное влияние на стационарный режим граничного трения. Это следует из данных, представленных на рис. 1.14, поскольку в определенном диапазоне давлений наблюдается немонотонность, приводящая к возникновению прерывистого режима трения, который представляет собой фазовые переходы между кинетическими состояниями смазочного материала. На рис. 1.6а видно, что рост нагрузки приводит к немонотонному изменению частоты фазовых переходов. Из этого следует, что внешняя на-

грузка оказывает существенное влияние на структуру смазочного материала в режиме граничного трения. Изменение типа фазового перехода с ростом внешней нагрузки L получено нами теоретически в разделах 5 и 6 диссертации.

1.2. Модель сухого трения Прандтля – Томлинсона

На сегодняшний день существует много теоретических моделей твердого тела, позволяющих описать процессы, происходящие при изменении внешних воздействий (температуры, давления, и т.д.). В последние годы также активно развиваются методы молекулярной динамики [138, 139]. Одной из наиболее широко используемых для описания процессов в нанотрибологических системах и исследований фрикционных механизмов на атомном масштабе является так называемая модель Томлинсона. В этой модели исследуется движение материальной точки массой m в периодическом потенциале в результате действия внешней силы. Однако, само название "модель Томлинсона" исторически неверно [140]. Статья Томлинсона [118], опубликованная им в 1929 году, которая часто цитируется в этом контексте, на самом деле не содержит модель, известную как "модель Томлинсона", а посвящена изучению вклада в трение адгезионных сил. В действительности указанная модель была предложена Людвигом Прандтлем в 1928 г., который использовал ее для описания пластической деформации в кристаллах и сухого трения [141]. Поэтому будем называть эту модель моделью "Прандтля – Томлинсона", как это предложили авторы работы [140].

1.2.1. Формулировка модели

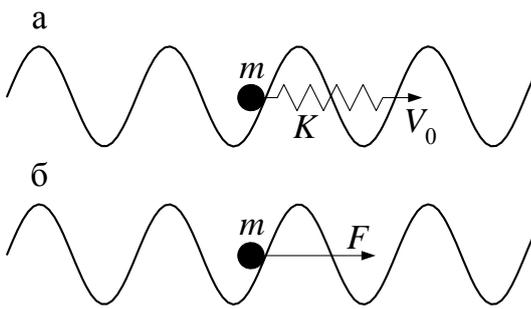
При построении своей модели, которая в последствии стала классической, Людвиг Прандтль исходил из того, что процесс пластической деформации в твердых телах можно описать как движение упруго связанных атомов вдоль периодического потенциала, который создает соседний атомарный слой. Для выяснения

особенностей такого поведения Прандтль в начале рассмотрел одномерное движение материальной точки массы m в фиксированном периодическом потенциале (см. рис. 1.15). Несмотря на простоту такого подхода, он позволил сделать многие заключения о влиянии атомного строения на физические свойства твердых тел, впоследствии подтвержденные более обоснованными с физической точки зрения теориями. На рис. 1.15а схематически показана модель, в которой материальная точка движется под действием упругой силы $K\Delta x$, где K — жесткость пружины, а Δx — ее растяжение.

При этом с учетом силы вязкого трения, пропорциональной скорости сдвига, уравнение движения запишется в виде

$$m\ddot{x} = K(V_0t - x) - \eta\dot{x} - N \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \quad (1.7)$$

где x — координата тела (атома), η — коэффициент затухания, N — амплитуда



периодической силы, a — пространственный период потенциала.

В случае очень мягкой пружины движение в течение одного или нескольких периодов не изменяет упругую силу F , которую можно считать постоянной. В этом случае модель может быть сведена к виду

$$m\ddot{x} = F - \eta\dot{x} - N \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \quad (1.8)$$

Рис. 1.15. Движение материальной точки массой m в периодическом потенциале: (а) к материальной точке прикреплена пружина с жесткостью K , скорость свободного конца которой V_0 ; (б) к материальной точке приложена постоянная сила F (предел "очень мягкой" пружины).

как это показано на рис. 1.15б. После анализа одномерной модели (1.7), Прандтль обобщает результаты на систему, состоящую из большого количества независимых "атомов", при-

крепленных к основанию, в частности с различными жесткостями связей.

1.2.2. Статическая и кинетическая силы трения

Даже простейшая модель с одним атомом в периодическом потенциале позволяет понять некоторые важные аспекты физики трения. Рассмотрим случай,

когда к покоящемуся атому приложена постоянная сила F (см. рис. 1.15б). При этом для того, чтобы атом оставался в покое (находился в локальном минимуме потенциала), согласно уравнению (1.8), необходимо выполнение условия

$$F = N \sin \left(\frac{2\pi x}{a} \right). \quad (1.9)$$

Последнее уравнение имеет решение только при

$$F < F_s = N. \quad (1.10)$$

Таким образом, сила F_s является аналогом статической силы трения. При $F > F_s$ атом начинает скользить по потенциальному рельефу.

Если в режиме скольжения постепенно уменьшать силу F , то скольжение будет наблюдаться до значения силы $F = F_b < F_s$. Для нахождения F_b рассмотрим предел слабого затухания [3]. В случае отсутствия затухания ($\eta = 0$), если тело приведено в движение, оно будет двигаться бесконечно долго даже при отсутствии внешней силы ($F = 0$). Закон сохранения энергии при $\eta = 0$, $F = 0$ запишется в виде

$$E_0 = \frac{mV^2}{2} - \frac{Na}{2\pi} \cos \left(\frac{2\pi x}{a} \right) = \text{const.} \quad (1.11)$$

При этом легко определить скорость движения тела как функции его координаты x :

$$V = \sqrt{\frac{2}{m} \left[E_0 + \frac{Na}{2\pi} \cos \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \right]}. \quad (1.12)$$

В случае слабого затухания для обеспечения стационарного движения необходима внешняя сила $F \neq 0$. Стационарное движение реализуется в том случае, если совершаемая за пространственный период работа

$$A = Fa \quad (1.13)$$

равна потерям энергии за счет сил вязкого трения

$$A' = \int_0^T \eta V^2(t) dt, \quad (1.14)$$

где T – временной период, или время, за которое тело проходит расстояние, равное одному пространственному периоду a . Приравняв (1.13) к (1.14), имеем

$$Fa = \int_0^T \eta V^2(t) dt = \int_0^a \eta V(x) dx = \eta \int_0^a \sqrt{\frac{2}{m} \left[E_0 + \frac{Na}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right]} dx. \quad (1.15)$$

Из уравнения (1.15) легко определить минимальное значение силы F , при которой еще возможно движение. Согласно выражению (1.11) это значение соответствует величине энергии $E_0 = Na/(2\pi)$ и составляет

$$F = F_b = \frac{4\eta}{\pi} \sqrt{\frac{aN}{2\pi m}}. \quad (1.16)$$

В случае $F > F_b$ атом сможет преодолевать максимумы потенциального рельефа при движении за счет инерции. Таким образом, сила трения F_b является аналогом кинетической силы трения.

Найдем соотношение между параметрами модели, при котором сила трения покоя F_s (1.10) равна силе трения скольжения F_b (1.16). Для этого приравняем эти две силы ($F_s = F_b$), откуда получим

$$\eta = \eta_s = \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{2\pi m N}{a}}. \quad (1.17)$$

Величина η_s в формуле (1.17) определяет границу областей с малым и большим затуханием.

1.2.3. Предел сильного затухания

При больших значениях коэффициента затухания (вязкости) $\eta \gg \eta_s$ уравнение (1.8) с достаточной точностью можно записать в таком виде:

$$0 = F - \eta \dot{x} - N \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right). \quad (1.18)$$

В этом случае реализуется передемпфированное движение, описываемое дифференциальным уравнением первого порядка (1.18), которое можно представить в следующем виде

$$\frac{dx}{dt} = \frac{F}{\eta} - \frac{N}{\eta} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right). \quad (1.19)$$

Определим время, за которое тело проходит расстояние, численно равное одному пространственному периоду:

$$T = \int_0^a \frac{\eta dx}{F - N \sin(2\pi x/a)} = \frac{\eta a}{2\pi N} \int_0^{2\pi} \frac{dz}{F/N - \sin z} = \frac{\eta a}{N \sqrt{F^2/N^2 - 1}}. \quad (1.20)$$

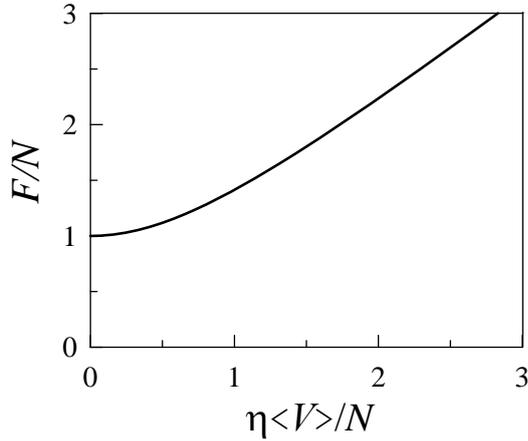


Рис. 1.16. Зависимость нормированной силы трения от нормированной средней скорости (1.23) для передемпфированной системы.

Поэтому среднее значение скорости скольжения

$$\langle V \rangle = \frac{a}{T} = \frac{\sqrt{F^2 - N^2}}{\eta}, \quad (1.21)$$

откуда легко записать силу трения как функцию средней скорости за период:

$$F = \sqrt{N^2 + (\eta \langle V \rangle)^2}. \quad (1.22)$$

Зависимость (1.22) удобно записать в безразмерном виде:

$$\frac{F}{N} = \sqrt{1 + \left(\frac{\eta \langle V \rangle}{N} \right)^2}. \quad (1.23)$$

Зависимость (1.23) показана на рис. 1.16, из которого видно, что движение со скоростью $\langle V \rangle > 0$ начинается с момента $F > F_s = N$, что согласуется с формулой (1.10).

1.2.4. Фазовая диаграмма

Введя безразмерные параметры $x = \xi \tilde{x}$, $t = \tau \tilde{t}$, перепишем уравнение (1.8) в виде

$$\frac{m\xi}{N\tau^2} \frac{\partial^2 \tilde{x}}{\partial \tilde{t}^2} = \frac{F}{N} - \frac{\eta\xi}{N\tau} \frac{\partial \tilde{x}}{\partial \tilde{t}} - \sin\left(\frac{2\pi}{a} \xi \tilde{x}\right). \quad (1.24)$$

После выбора условий

$$\frac{2\pi\xi}{a} = 1; \quad \frac{\tau^2 N}{m\xi} = 1 \quad (1.25)$$

уравнение (1.24) запишется как

$$\frac{\partial^2 \tilde{x}}{\partial \tilde{t}^2} + \kappa_1 \frac{\partial \tilde{x}}{\partial \tilde{t}} + \sin \tilde{x} = \kappa_2, \quad (1.26)$$

где

$$\kappa_1 = \frac{\eta\sqrt{a}}{\sqrt{2\pi mN}}; \quad \kappa_2 = \frac{F}{N}. \quad (1.27)$$

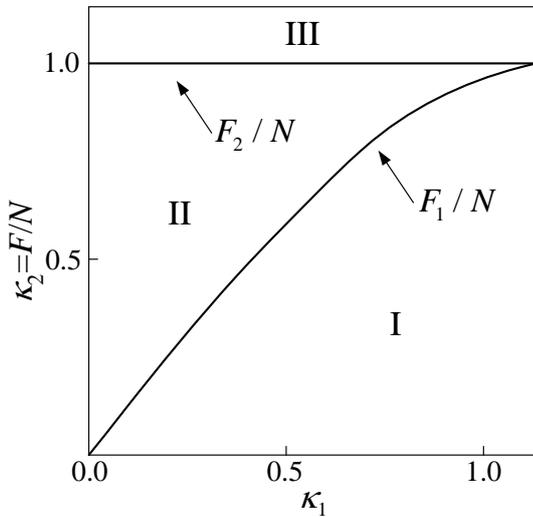


Рис. 1.17. "Фазовая диаграмма" модели Прандтля – Томлинсона.

Уравнение (1.26) содержит лишь два безразмерных параметра κ_1 и κ_2 , что позволяет построить фазовую диаграмму, которая показана на рис. 1.17. При значении параметра $\kappa_1 < 1,193$ реализуются три области, разграниченные критическими силами F_1 и F_2 . В случае $F > F_2$ (область III) тело все время движется, поскольку равновесное состояние не реализуется. При значении $F < F_1$ (область I) тело находится в состоянии покоя. Между областями I и III существует область бистабильности II, в которой тело находится либо в состоянии покоя, либо движется, в зависимости от начальных условий. Область бистабильности исчезает при значении $\kappa_1 > 1,193$.

1.2.5. Прерывистый (*stick-slip*) режим

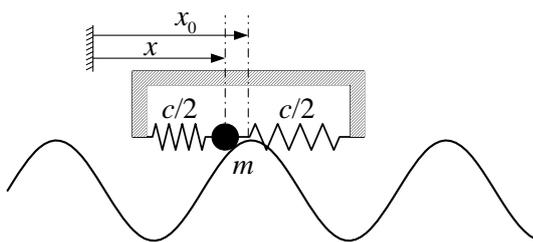


Рис. 1.18. Тело массой m , приводимое в движение с помощью пружины, закрепленной на скользящем суппорте.

На рис. 1.18 показано обобщение модели Прандтля – Томлинсона. Здесь на тело действует не постоянная сила, а сила, создаваемая при помощи пружины с жесткостью c . Подобные модели используются, к примеру, при описании движения кантилевера в атомно-силовом микроскопе. В рассматриваемом случае уравнение движения принимает вид

$$m\ddot{x} + \eta\dot{x} + \frac{\partial U}{\partial x} = c(x_0 - x). \quad (1.28)$$

В случае, когда мы перемещаем суппорт с постоянной скоростью, тело в каждый момент времени будет находиться в положении равновесия $x(x_0)$, где координата

суппорта $x_0 = x_0(t)$. В [3] показано, что при движении в произвольном периодическом потенциале среднее по времени значение силы упругости пружины, которое задает макроскопическую силу трения, тождественно принимает нулевое значение. Однако, ситуация изменяется в случае, когда равновесная координата тела x не есть непрерывной функцией координаты x_0 . К примеру, это выполняется для потенциала вида

$$U(x) = -\frac{Na}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \quad (1.29)$$

при выполнении условия

$$\frac{ac}{2\pi N} < 1. \quad (1.30)$$

Другими словами, при выполнении условия (1.30) среднее значение силы $F = c(x_0 - x)$ по времени отлично от нуля. После подстановки выражения (1.29) в уравнение (1.28), имеем

$$m\ddot{x} + \eta\dot{x} + N \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = c(x_0 - x). \quad (1.31)$$

Условие равновесия может быть найдено из (1.31) при $\dot{x} = 0$:

$$\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) = \frac{c}{N}(x_0 - x), \quad (1.32)$$

где справа стоит нормированная действующая сила F/N . Анализ последнего выражения позволяет построить зависимости нормированной силы F/N от безразмерной координаты суппорта $2\pi x_0/a$, показанные на рис. 1.19. В рассматриваемом случае реализуется прерывистый характер движения (в англоязычной терминологии *stick-slip motion*). Оказывается, что характер поведения системы зависит только от величины соотношения $ac/(2\pi N)$ (1.30) [3]. Зависимость, показанная на рис. 1.19а соответствует случаю мягкой пружины [3]. На рис. 1.19б в случае более жесткой пружины устанавливается реверсивное движение, когда сила трения периодически меняет знак на противоположный.

1.3. Модель Френкеля – Конторовой

Описанная выше модель Прандтля – Томлинсона применяется также для описания поведения большого количества частиц, которые не взаимодействуют меж-

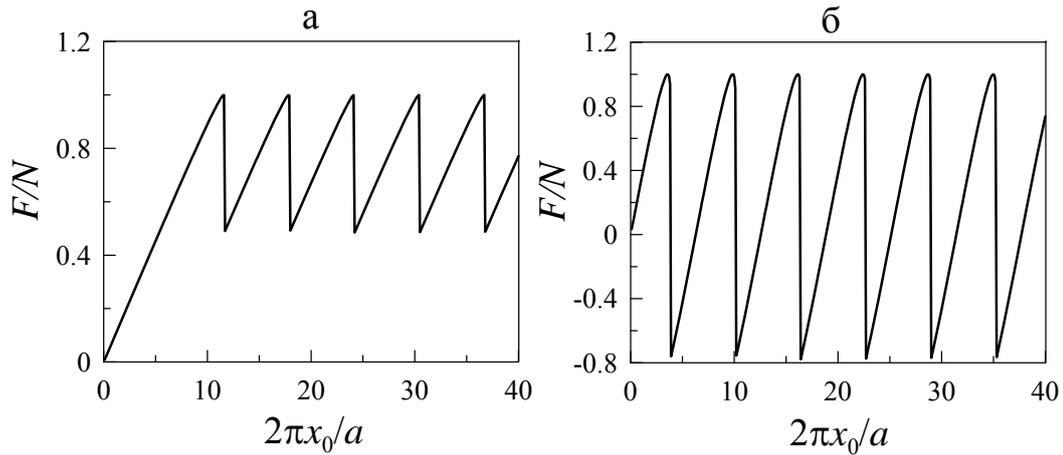


Рис. 1.19. Зависимости нормированной силы F/N от безразмерной координаты суппорта $2\pi x_0/a$, соответствующие модели (1.31): (а) $ac/(2\pi N) = 0, 1$; (б) $ac/(2\pi N) = 0, 5$.

ду собой. Однако, в физических телах соседние атомы всегда взаимодействуют. Если ввести взаимодействие между частицами, то мы получим более реалистичное обобщение модели Прандтля – Томлинсона, которое получило название модели Френкеля – Конторовой. В наши дни эта модель является одним из универсальных инструментов низкоразмерной нелинейной физики. Модель описывает цепочку классических частиц, связанных с соседями, и находящихся в периодическом потенциале подложки. Классическая модель Френкеля – Конторовой была предложена в 1938 году для описания структуры и динамики кристаллической решетки около ядра дислокации [142]. За прошедшие годы различные модификации модели были использованы в большом количестве различных физических задач. В частности, модель активно используется для изучения разнообразных явлений в нанотрибологии [143–147]. В этих работах изучаются различные аспекты сухого трения, гистерезисного поведения наноразмерных трибологических систем, трения скольжения, прерывистого режима граничной смазки и т.п.

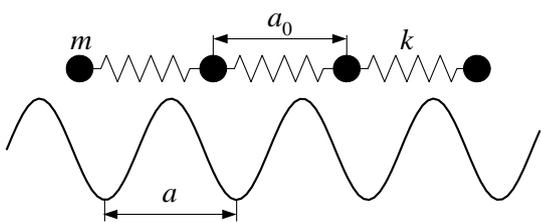


Рис. 1.20. Схематическое представление модели Френкеля – Конторовой.

Модель Френкеля – Конторовой схематически показана на рис. 1.20. Здесь показана цепочка частиц массой m , связанных гармоническими пружинами с коэффициентом жесткости K , которая взаимодействует с внешним периодическим потенциалом периода a . Через a_0

обозначен равновесный шаг цепи. Для системы, показанной на рис. 1.20, можно записать гамильтониан вида

$$\mathcal{H} = K' + U, \quad (1.33)$$

где кинетическая энергия системы частиц K' определяется как

$$K' = \frac{m}{2} \sum_n \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2, \quad (1.34)$$

где m — масса частицы, x_n — координата n -той частицы. Потенциальная энергия будет иметь две составляющие:

$$U = U_{sub} + U_{int}. \quad (1.35)$$

В выражении (1.35) слагаемое U_{sub} описывает взаимодействие цепи с внешним потенциалом, и в простейшем случае может быть представлена в виде

$$U_{sub} = \frac{\varepsilon_s}{2} \sum_n \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi x_n}{a} \right) \right], \quad (1.36)$$

где ε_s — амплитуда потенциала, а a — его период. Второе слагаемое U_{int} в формуле (1.35) задает гармоническое (линейное) взаимодействие между ближайшими соседними звеньями и записывается в виде

$$U_{int} = \frac{k}{2} \sum_n (x_{n+1} - x_n - a_0)^2. \quad (1.37)$$

После введения безразмерных переменных

$$\tilde{a}_0 = \frac{2\pi a_0}{a}; \quad \tilde{x}_n = \frac{2\pi x_n}{a}; \quad \tilde{t} = \frac{2\pi t}{a\sqrt{2m/\varepsilon_s}}; \quad \tilde{K} = \frac{2a^2 K}{4\pi^2 \varepsilon_s} \quad (1.38)$$

гамильтониан (1.33) запишется как ($H = 2\mathcal{H}/\varepsilon_s$):

$$H = \sum_n \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{d\tilde{x}_n}{d\tilde{t}} \right)^2 + (1 - \cos \tilde{x}_n) + \frac{\tilde{K}}{2} (\tilde{x}_{n+1} - \tilde{x}_n - \tilde{a}_0)^2 \right\}. \quad (1.39)$$

В виде (1.39) гамильтониан H описывает гармоническую цепочку частиц единичной массы, находящихся во внешнем синусоидальном потенциале с периодом $a = 2\pi$ и амплитудой $\varepsilon_s = 2$. Соответствующее уравнение движения запишется как

$$\frac{d^2 \tilde{x}_n}{d\tilde{t}^2} + \sin \tilde{x}_n - \tilde{K} (\tilde{x}_{n+1} + \tilde{x}_{n-1} - 2\tilde{x}_n) = 0. \quad (1.40)$$

Стоит отметить, что последнее уравнение не содержит явным образом равновесный шаг цепи a_0 [148]. С помощью модели Френкеля – Конторовой можно получить все результаты, которые дает модель Прандтля – Томлинсона, причем теперь уже можно говорить не только о качественном, но и о количественном описании поведения конкретных физических систем.

1.4. Кинетическая модель граничного трения Карлсона – Батисты

В работах [131, 149] предложена простая кинетическая модель граничного трения, построенная авторами на основе экспериментальных результатов, в основном представленных в работе [12]. Отметим, что авторам в рамках указанной модели удалось описать большой ряд экспериментально наблюдаемых особенностей, таких как уменьшение частоты фазовых переходов с ростом скорости сдвига за счет появления на зависимости силы трения от времени $F(t)$ длинных кинетических участков, зависимость высоты ”пика прилипания“ (*stiction spike*) от времени остановки системы t_s , переход от прерывистого режима трения к устойчивому скольжению, некоторые особенности ”*stop-start*“ экспериментов, затвердевание смазочного слоя при нулевой скорости проскальзывания, частичное затвердевание при низких скоростях сдвига, и многое другое. Эта модель является одной из первых, в которой приведено такое масштабное теоретическое исследование граничного режима. В этом подразделе приведем краткое описание модели и ее основные результаты.

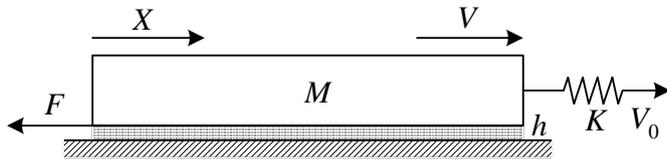
1.4.1. Формулировка модели

Уравнение движения верхнего блока в трибологической системе, показанной на рис. 1.21, имеет вид [12, 121, 131, 149]:

$$M\ddot{X} = K(V_0t - X) - F. \quad (1.41)$$

В уравнении (1.41) одна неопределенная величина – это сила трения F . Построение любой подобной модели начинается с определения силы трения, основываясь на физических представлениях задачи. В [131, 149] для

описания состояния смазочного материала вводится параметр θ , описывающий степень "расплавленности" смазки. При этом сила трения F зависит как от относительной скорости перемещения трущихся поверхностей $V = \dot{X}$, так и от состояния системы θ , и записывается в виде



$$F = \operatorname{sgn}(\dot{X})\theta + \beta\dot{X}, \quad (1.42)$$

Рис. 1.21. Механический аналог трибологической системы. Верхний блок движется со скоростью V с помощью пружины жесткостью K . Масса блока M , толщина смазки h . Свободный конец пружины движется со скоростью V_0 . При движении между поверхностями возникает сила трения F , координата верхнего блока X .

где параметр β имеет смысл вязкости. Кинетика параметра θ определяется уравнением

$$\dot{\theta} = \frac{(\theta - \theta_{\min})(\theta_{\max} - \theta)}{\tau} - \alpha(\theta - \theta_{\min})\dot{X}, \quad (1.43)$$

а параметр θ принимает значения от θ_{\min} до θ_{\max} , причем θ_{\min} соответствует полностью расплавленной смазке, а θ_{\max} — полностью затвердевшей. В уравнении (1.42) для учета направления движения введена знаковая функция, определяемая стандартным образом:

$$\operatorname{sgn}(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ -1, & x < 0. \end{cases} \quad (1.44)$$

Сила трения F принимает максимальные значения в состоянии покоя $\dot{X} = 0$ (статическое трение), а при движении ($\dot{X} > 0$) сила F уменьшается. Уравнение (1.42) выражает простейшую зависимость, где влияние на силу трения относительной скорости движения контактирующих поверхностей и состояния смазочного материала учтены линейным образом. В состоянии покоя $\dot{X} = 0$ сила трения принимает максимальное значение $F = \theta$, соответствующее статическому трению.

Параметр состояния θ согласно уравнению (1.43) зависит от времени и заключен в отрезке $\theta_{\min} \leq \theta \leq \theta_{\max}$, границы которого соответствуют пределам динамического и статического трения. Уравнение (1.43) построено так, что значение $\theta = \theta_{\min}$, соответствующее жидкостному трению, является неустойчивым.

Состояние $\theta = \theta_{\max}$ является устойчивым, поскольку в состоянии покоя система релаксирует к указанному значению со временем релаксации τ^{-1} . Такая особенность модели соответствует экспериментам, в которых показано, что при реализации прерывистого режима движения смазка в состоянии покоя $\dot{X} = 0$ твердоподобна [12]. Второе слагаемое в правой части (1.43) описывает сдвиговое плавление. Параметр $1/\alpha$ в выражении (1.43) играет роль характеристической длины плавления, то есть это время прилипания, за которое происходит плавление. Вместе уравнения (1.41), (1.42) и (1.43) полностью задают модель, которая способна качественно описать широкий спектр экспериментально обнаруженных эффектов, наблюдающихся в режиме граничного трения.

Систему основных уравнений можно записать в более простом виде, если ввести новые переменные вида $\theta' = (\theta - \theta_{\min})/(\theta_{\max} - \theta_{\min})$, где $\theta' = 0$ отвечает полностью расплавленной смазке, а $\theta' = 1$ — полностью затвердевшей; $t' = t/\sqrt{M/K}$; $X' = K(X - \theta_{\min}/K)/\mathcal{F}$, где $\mathcal{F} = \theta_{\max} - \theta_{\min}$; $V_0' = V_0\sqrt{MK}/\mathcal{F}$; $\beta' = \beta/\sqrt{MK}$; $\tau' = \tau\sqrt{K/M}/\mathcal{F}$; $\alpha' = \alpha\mathcal{F}/K$. Если после соответствующей замены переменных убрать штрихи, получим безразмерную систему вида [131]

$$\ddot{X} = (V_0 t - X) - F, \quad (1.45)$$

$$F = \begin{cases} (-\infty, \theta], & \dot{X} = 0, \\ \operatorname{sgn}(\dot{X})\theta + \beta\dot{X}, & \dot{X} > 0, \end{cases} \quad (1.46)$$

$$\dot{\theta} = \frac{\theta(1-\theta)}{\tau} - \alpha\theta\dot{X}. \quad (1.47)$$

1.4.2. Результаты моделирования

На рис. 1.22 показан результат численного решения системы (1.45)–(1.47). На этом рисунке показана зависимость силы натяжения пружины $F_0 = (V_0 t - X)$ как функция времени, которая по своему виду аналогична полученной экспериментально в работе [12]. При численном решении уравнения выбирались начальные значения параметров $V^0 = 0$; $X^0 = -0, 1$; $\theta^0 = 0, 1$; $F^0 = 0$. Отрицательное начальное значение координаты X связано с тем, что в начале движения пружина должна быть натянута, иначе модель показывает неадекватное поведение, что

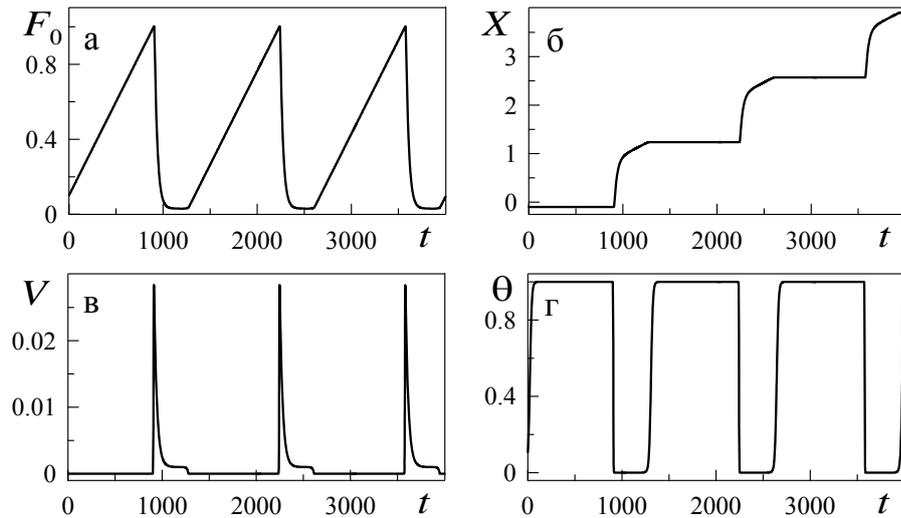


Рис. 1.22. Зависимости силы натяжения пружины $F_0 = (V_0 t - X)$, координаты блока X , его скорости $V = \dot{X}$ и параметра состояния системы θ от времени t , полученные при численном решении уравнений (1.45)–(1.47) при параметрах $\alpha = 30$, $\tau = 10$, $\beta = 30$, $V_0 = 0,001$.

связано с особенностями численного счета. Отметим также, что поскольку при численном моделировании ситуация $\dot{X} = 0$ практически никогда не достигается, для моделирования достаточно использования второго уравнения в конструкции (1.46), однако при этом на зависимости силы трения $F(t)$, найденной численно до момента плавления при $\theta = 1$ осуществляются постоянные скачки между положительным и отрицательным значениями $F = \pm 1$, поскольку при численном решении дифференциальных уравнений $V = 0$ означает, что скорость принимает близкие к нулю значения (в нашем случае порядка 10^{-9}), и постоянно меняет свой знак, что и приводит к изменению знака силы трения F . Однако, описанная ситуация не имеет физического смысла, поскольку при движении свободного конца пружины с постоянной скоростью V_0 со временем происходит натяжение пружины и до момента плавления сила трения F будет численно равна силе натяжения пружины $F_0 = (V_0 t - X)$, поскольку, как это видно из рис. 1.22, реализуется статическое трение. Эту особенность учитывает первая строка в выражении (1.46). Поскольку на рисунке мы не показываем непосредственно силу трения F , при численном счете ее можно не использовать.

На рис. 1.22 видно, что при выбранных параметрах наблюдается прерывистый *stick-slip* режим движения, часто наблюдаемый как экспериментально, так и при

компьютерном моделировании [12, 150]. Следует отметить, что согласно зависимости $\theta(t)$ при выбранных параметрах плавление и затвердевание происходит практически мгновенно, однако время плавления/затвердевания можно варьировать выбором времени релаксации τ^{-1} в уравнении (1.47). Особенностью модели является то, что здесь осуществляется переход между двумя структурными состояниями со значениями $\theta = 0$ (расплавленная смазка) и $\theta = 1$, что соответствует ”прилипанию“ поверхностей трения и статическому трению, поскольку при значении $\theta = 1$ блок не движется ($\dot{X} = V = 0$). Это накладывает определенное ограничение, поскольку только некоторые смазки могут вести себя таким образом. Довольно часто в роли смазочных материалов используются полимерные растворы и расплавы, представляющие цепные молекулы, не способные организовать упорядоченные структуры, поэтому при наличии внешних упругих напряжений под их действием происходит течение смазочного слоя даже в твердоподобном состоянии, просто скорость течения на порядки меньше, чем в жидкоподобном. Данная модель не позволяет показать такое поведение и подходит для описания систем, где как смазка используются квазисферические молекулы, например, молекулы ОМЦТС $C_8H_{24}O_4Si_4$ [87], которые способны образовывать твердоподобные упорядоченные структуры, характеризующиеся наличием дальнего порядка чередования молекул. Существенным недостатком модели является также то, что она не исходит из каких-либо физических представлений, поскольку записанные уравнения (1.42), (1.43) не выводятся из физических принципов, а лишь качественно задают влияние скорости движения, вязкости и т.п.

Однако, несмотря на наличие ограничений к применению модели, она дает вполне адекватные результаты и позволяет описывать многие экспериментально наблюдаемые эффекты. К примеру, на рис. 1.23 показана зависимость силы натяжения пружины от времени, где видно, что с ростом скорости движения свободного конца пружины V_0 увеличивается длина кинетических участков $F_0 = F_k = \text{const}$. Многие эксперименты показывают, что сначала с ростом скорости сдвига частота фазовых переходов увеличивается, а затем снова уменьшается за счет появления длинных кинетических участков. Рис. 1.23 показывает анало-

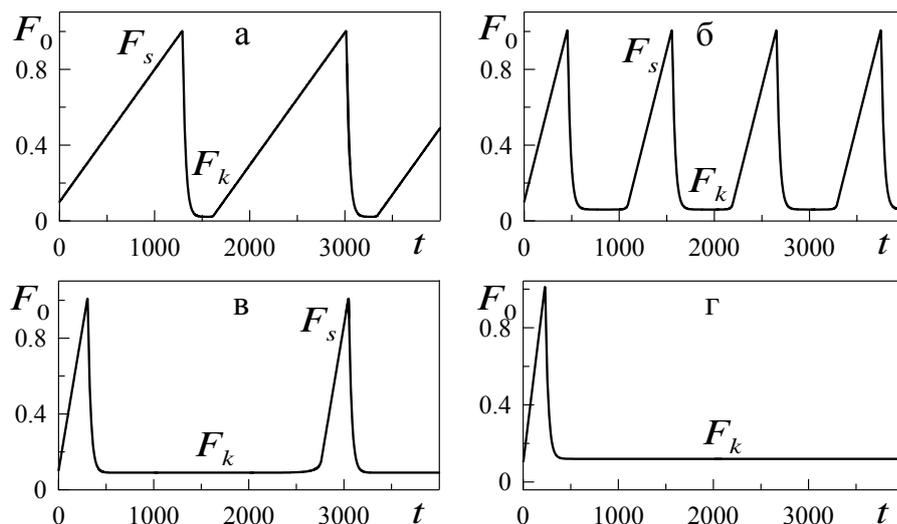


Рис. 1.23. Зависимости силы натяжения пружины $F_0 = (V_0 t - X)$ от времени t для различных скоростей движения свободного конца пружины: (а) $V_0 = 0,0007$; (б) $V_0 = 0,002$; (в) $V_0 = 0,003$; (г) $V_0 = 0,004$.

гичное поведение. Отметим, что для значения скорости $V_0 = 0,004$ (рис. 1.23г) после однократного плавления система продолжает функционировать в кинетическом режиме скольжения, когда смазка полностью расплавлена. Критическая скорость, с превышением которой наблюдается плавление, для выбранных параметров модели составляет $V_{0,\text{crit}} \approx 0,0033$ [131]. Причем на рис. 1.23г видно, что перед плавлением на зависимости силы натяжения пружины от времени имеет место пик, которой также наблюдается экспериментально и называется "пик прилипания" (в англоязычной литературе "stiction spike"). Отметим, что особенностью модели является то, что с ростом скорости V_0 увеличивается значение кинетической силы трения F_k , что вполне логично, поскольку с ростом V_0 увеличивается скорость проскальзывания блока V (см. рис. 1.21), и соответственно вязкая сила трения F_k также растет.

1.5. Термодинамическое представление переходов между статическим и кинетическим трением в режиме граничной смазки (модель Попова)

В работе [151] предложена простая интуитивно понятная модель, описывающая поведение тонкого смазочного слоя, зажатого между двумя атомарно-

гладкими твердыми поверхностями. Модель сочетает в себе теорию фазовых переходов Ландау и модель Френкеля – Конторовой. В работе получено кинетическое уравнение для модуля сдвига и приводится его решение совместно с уравнением, описывающим движение смазочного слоя. Аналитически рассчитаны максимальные значения статической и кинетической сил трения. Также определены зависимости кинетических напряжений от скорости скольжения. В модели введен безразмерный параметр κ , определяющий состояние смазочного слоя в процессе трения. При малых значениях κ слой смазки находится в жидком состоянии, а если κ превышает определенное критическое значение, плавления не происходит. Показано, что переход от статического к кинетическому трению происходит в интервале очень малых скоростей сдвига, который определяется как отношение параметра решетки ко времени релаксации модуля сдвига. Отметим, что работа [151] является одной из первых работ такого плана, поскольку в ней разработана теория, достаточно полно описывающая многие особенности, происходящие в ультратонком смазочном слое в процессе граничного трения, которые до этого многократно наблюдались экспериментально. Теория, разработанная в [151], послужила фундаментом для большого количества теоретических исследований, часть из которых проведена автором настоящей диссертационной работы и излагается в последующих оригинальных разделах диссертации. В связи с несомненной важностью исследований, проведенных в [151], приведем основные результаты теории в этом подразделе литературного обзора.

1.5.1. Подход, основанный на модели Френкеля – Конторовой, описывающей движение в периодическом потенциале

В случае, когда смазочный материал находится в кристаллическом состоянии, любые два соседних молекулярных слоя в нем создают периодический потенциал. Плавление же означает исчезновение периодической составляющей потенциала взаимодействия. Причем степень ”твердости“ жидкого слоя твердых частиц, заключенных между твердыми поверхностями, не однородна по толщине слоя,

поскольку упорядочение и послойная структура в плоскости скольжения более выражены в непосредственной близости от поверхности твердых тел и уменьшаются к центру слоя [152]. Поэтому периодический потенциал имеет максимум для слоев, расположенных вблизи твердых стенок и минимум в середине слоя. Такая особенность приводит к тому, что при движении трущихся поверхностей, разделенных ультратонким слоем смазочного материала, пластически деформируется не вся смазка, а деформация происходит вдоль единственной плоскости внутри слоя, в котором периодическая компонента потенциала является наименьшей [153]. Такое поведение особенно выражено для смазок, имеющих небольшое количество мономолекулярных слоев.

Пусть периодическая составляющая поверхностной плотности потенциальной энергии взаимодействия (энергия на единицу площади поверхности)

$$\begin{aligned}\delta U(u) &= -U_0 \cos k_0 u, \\ k_0 &= \frac{2\pi}{a},\end{aligned}\tag{1.48}$$

где u — относительное смещение слоя от положения равновесия, a — параметр решетки или межатомное расстояние, а U_0 — феноменологическая постоянная, которая, как это показано ниже, зависит от относительного смещения двух слоев. Вблизи минимума при $u = 0$ плотность потенциальной энергии имеет вид

$$\delta U(u) \approx -U_0 + \frac{1}{2}U_0 k_0^2 u^2.\tag{1.49}$$

Вблизи равновесия упругие напряжения, действующие в смазочном слое, определяются как

$$\sigma_{el} = \frac{\partial U(u)}{\partial u} \approx U_0 k_0^2 u = U_0 k_0^2 h \varepsilon,\tag{1.50}$$

где h — толщина слоя, а ε — относительная деформация. Из соотношения (1.50) следует выражение для модуля сдвига смазочного материала:

$$\mu = U_0 k_0^2 h.\tag{1.51}$$

Измеряя потенциальную энергию от минимума и используя уравнение (1.51), мы можем записать поверхностную плотность потенциальной энергии в виде

$$U(u) = \frac{\mu}{k_0^2 h} (1 - \cos k_0 u).\tag{1.52}$$

Для произвольного относительного смещения плоскостей напряжения являются периодической функцией смещения:

$$\sigma_{el} = \frac{\partial U(u)}{\partial u} = \frac{\mu}{k_0 h} \sin k_0 u. \quad (1.53)$$

В случае, когда монослои находятся в относительном движении, вязкие напряжения пропорциональны относительной скорости сдвига:

$$\sigma_v = \eta \dot{u}. \quad (1.54)$$

Полные напряжения в слое определяются как сумма упругой (1.53) и вязкой (1.54) компонент:

$$\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v = \frac{\mu}{k_0 h} \sin k_0 u + \eta \dot{u}. \quad (1.55)$$

Следует также учитывать, что модуль сдвига μ (1.51) в уравнении (1.52) является функцией температуры и становится нулевым при температуре, превышающей температуру плавления. Указанный переход может быть описан в рамках формализма, предложенного в работе [154]. Введем параметр порядка φ , имеющий смысл амплитуды периодической части микроскопической функции плотности среды, который принимает ненулевое значение при переходе из жидкого в твердое состояние. В этом случае модуль сдвига может быть представлен как квадрат параметра порядка:

$$\mu = \varphi^2. \quad (1.56)$$

В случае реализации фазового перехода второго рода [155] разложение объемной плотности свободной энергии по степеням параметра порядка имеет вид¹

$$\Phi_{therm} = a\varphi^2 + \frac{b}{2}\varphi^4, \quad (1.57)$$

¹Возможность плавления по механизму фазового перехода второго рода не противоречит выводу Ландау о том, что плавление всегда является фазовым переходом первого рода [156], поскольку последнее относится только к неограниченной среде и предполагает переход из состояния с дискретной группой симметрии в изотропное состояние, инвариантное по отношению к поворотам. В данном случае, инвариантность относительно вращений нарушается, даже в жидком состоянии, в связи с наличием ограничивающих поверхностей и присутствием выбранного направления в плоскости слоя (направление деформации).

где параметры a и b являются функциями термодинамических параметров состояния — температуры и давления. Вблизи критической температуры плавления T_c имеем

$$a(T) = \alpha(T - T_c). \quad (1.58)$$

Свободная энергия (1.57) описывает систему в состоянии с минимальной энергией, т.е. в упруго недеформированном состоянии. В кристаллической фазе, в результате неисчезающей поперечной жесткости системы среда может быть переведена в деформированное метастабильное состояние. Для описания этого состояния мы должны добавить к свободной энергии (1.57) вклад (1.52), связанный с относительным смещением поверхностных слоев, разделенных слоем толщиной h (для получения объемной плотности). Таким образом, полная объемная плотность свободной энергии с учетом (1.51), (1.56) может быть записана в виде

$$\Phi = \alpha(T - T_c) \varphi^2 + \frac{b}{2} \varphi^4 + \frac{\varphi^2}{k_0^2 h^2} (1 - \cos k_0 u). \quad (1.59)$$

Минимизация свободной энергии по параметру φ дает следующее уравнение для равновесного значения параметра порядка:

$$\alpha(T - T_c) \varphi + b\varphi^3 + \frac{\varphi}{k_0^2 h^2} (1 - \cos k_0 u) = 0. \quad (1.60)$$

Для температуры $T < T_c$ и смещения $u = 0$ смазочный слой находится в твердом состоянии с модулем сдвига

$$\mu = \varphi^2 = \frac{\alpha(T_c - T)}{b} \neq 0. \quad (1.61)$$

При увеличении относительного смещения u происходит изменение стационарных значений параметра порядка и модуля сдвига:

$$\begin{aligned} \mu(u) = \varphi^2(u) &= \frac{\alpha(T_c - T) - (1 - \cos k_0 u) k_0^{-2} h^{-2}}{b} \times \\ &\times H\left(\alpha(T_c - T) - \frac{1 - \cos k_0 u}{k_0^2 h^2}\right), \end{aligned} \quad (1.62)$$

где функция Хевисайда $H(x)$ принимает нулевое значение при $x < 0$ и равна 1 при $x \geq 0$. В зависимости от параметра

$$\kappa = \frac{\alpha(T_c - T) k_0^2 h^2}{2} \quad (1.63)$$

может реализоваться два случая. В первом случае при $\kappa < 1$ существует критическое значение смещения u_c , определяемое выражением

$$\alpha(T_c - T) = \frac{1 - \cos k_0 u_c}{k_0^2 h^2}, \quad (1.64)$$

при котором равновесное значение параметра порядка становится нулевым, т.е. происходит плавление сдвигом [130]. Во втором случае при $\kappa > 1$ параметр порядка φ и, следовательно, модуль сдвига μ не исчезают при любом значении относительного смещения, поэтому сдвиговое плавление не реализуемо для любых значений перемещений. Максимальные упругие напряжения, которое могут быть созданы при сдвиге в смазочном слое, определяются выражением

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma} = & \left(\kappa - \frac{1}{2} \right) \sin \left(\arccos \left(\frac{1 - 2\kappa + \sqrt{4\kappa^2 - 4\kappa + 9}}{4} \right) \right) + \\ & + \frac{1}{4} \sin \left(2 \arccos \left(\frac{1 - 2\kappa + \sqrt{4\kappa^2 - 4\kappa + 9}}{4} \right) \right), \end{aligned} \quad (1.65)$$

где введено обозначение

$$\tilde{\sigma} = \sigma \frac{b}{2} (k_0 h)^3. \quad (1.66)$$

Зависимость (1.65) показана на рис. 1.24, который представляет фазовую диаграмму с различными режимами трения.

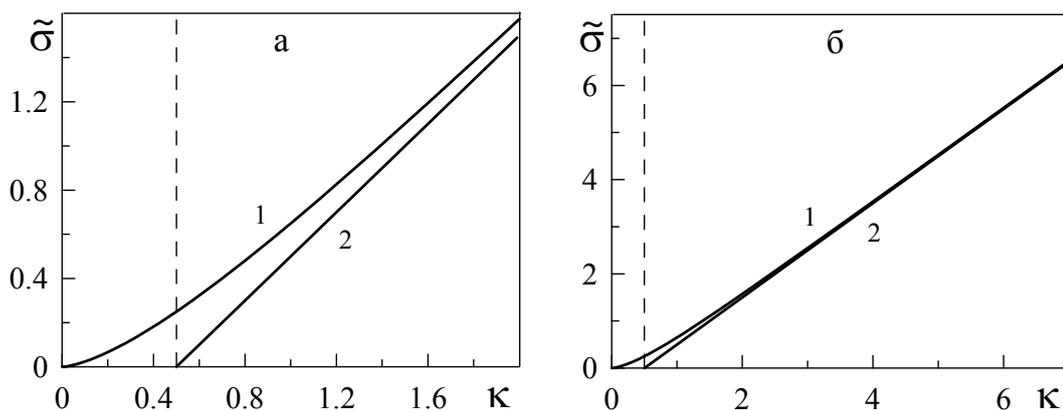


Рис. 1.24. Зависимость максимальных напряжений статического трения (кривая 1) и минимальных напряжений при скольжении (кривая 2) от κ (1.63). Справа от вертикальной пунктирной линии реализуется твердое состояние, при меньших значениях κ смазочный слой расплавлен.

1.5.2. Упругая деформация как управляющий параметр

В подразделе 1.5.1 описана модель граничного трения, предложенная в работе [151], основанная на модели Френкеля – Конторовой, описывающей движение в периодическом потенциале. В рамках модели получено два режима, соответствующие твердоподобной структуре смазочного материала либо расплавленному состоянию. Построена фазовая диаграмма, содержащая эти режимы. Однако, в конкретной экспериментальной ситуации неудобно пользоваться параметрами типа периода пространственной решетки. Тем более, в модели, описанной в подразделе 1.5.1, выбирается периодический синусоидальный потенциал, а в конкретных приложениях это довольно редкая ситуация. Поскольку как поверхности трения используются различные материалы, в частности широко используются слюдяные поверхности, потенциальный рельеф которых имеет довольно сложный вид и не сводится к синусоидальному потенциалу. Поэтому модель, приведенная в работе [151], является важной скорее с методологической точки зрения, поскольку является фактически первой работой, в которой предложена простая интуитивно понятная модель фазовых переходов в ультратонком слое смазочного материала, учитывающая концепции термодинамического и сдвигового плавления. В последующих работах [121, 122] автор работы [151] развивает идею, и вместо периодического потенциала вводит в рассмотрение упругую деформацию, которая является экспериментально измеряемой величиной. Приведем в этом подразделе кратко основные положения теории, предложенной в работе [121].

1.5.2.1. Формулировка модели и упругие напряжения

Основная идея обобщения модели [151], которое приведено в работе [121], состоит в том, что разложение (1.59) записывается в виде

$$\Phi = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{b}{2}\varphi^4 + \frac{1}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 + \frac{g}{2}(\nabla\varphi)^2, \quad (1.67)$$

где ε_{el} – упругая деформация. Последнее слагаемое учитывает пространственную неоднородность (разложение по степеням градиентов параметра порядка).

В выражении (1.67) модуль сдвига, как и ранее, равен квадрату параметра порядка $\mu = \varphi^2$ (1.56). Используя (1.67), упругие напряжения в слое запишутся как (ср. с (1.50))

$$\sigma_{el} = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{el}} = \varphi^2 \varepsilon_{el} = \mu \varepsilon_{el}. \quad (1.68)$$

Согласно разложению (1.67), в ненапряженном состоянии ($\varepsilon_{el} = 0$) при температуре смазки ниже критической $T < T_c$, как и ранее, реализуется стационарное состояние с ненулевым модулем сдвига, которое задается соотношением (1.61). При увеличении величины упругой деформации ε_{el} при сдвиге трущихся поверхностей стационарное значение модуля сдвига уменьшается (ср. с (1.62)):

$$\mu = \varphi^2 = \frac{\alpha(T_c - T) - \varepsilon_{el}^2/2}{b}. \quad (1.69)$$

Из последнего выражения следует, что при превышении упругой деформацией критической величины

$$\varepsilon_{el} > \varepsilon_{el,c} = \sqrt{2\alpha(T_c - T)} \quad (1.70)$$

модуль сдвига принимает нулевое значение, что отвечает расплавленному состоянию смазочного материала. Соотношение (1.70) описывает концепцию сдвигового и термодинамического плавления, поскольку указанное выражение задает критическое значение сдвиговой деформации, при котором происходит плавление за счет механического воздействия (сдвиговое плавление). Однако, с другой стороны, необходимое для плавления критическое значение деформации можно обратить в нуль повышением температуры смазочного материала до критического значения $T = T_c$, тогда плавление будет осуществляться без механического воздействия при $\varepsilon_{el} = 0$, т.е. в ситуации $T > T_c$ реализуется обычный случай термодинамического плавления.

С учетом вышесказанного можно записать выражение для упругих напряжений как функции упругой деформации в виде

$$\sigma_{el} = \mu \varepsilon_{el} = \begin{cases} \frac{\alpha(T_c - T) - \varepsilon_{el}^2/2}{b} \varepsilon_{el}, & \varepsilon_{el} < \varepsilon_{el,c}, \\ 0, & \varepsilon_{el} > \varepsilon_{el,c}. \end{cases} \quad (1.71)$$

При значении деформации $\varepsilon_{el} = \varepsilon_{el}^*$, где

$$\varepsilon_{el}^* = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3}\varepsilon_{el,c} \quad (1.72)$$

напряжения (1.71) достигают максимального значения σ_0 :

$$\sigma_0 = \frac{1}{b} \left[\frac{2\alpha(T_c - T)}{3} \right]^{3/2}. \quad (1.73)$$

После введения безразмерных величин в виде

$$\tilde{\varepsilon}_{el} = \frac{\varepsilon_{el}}{\varepsilon_{el,c}}; \quad \tilde{\sigma}_{el} = \frac{\sigma_{el}}{\sigma_0} \quad (1.74)$$

зависимость (1.71) переписется в более простой форме:

$$\tilde{\sigma}_{el} = \begin{cases} \frac{3\sqrt{3}}{2} (1 - \tilde{\varepsilon}_{el}^2) \tilde{\varepsilon}_{el}, & \tilde{\varepsilon}_{el} < 1, \\ 0, & \tilde{\varepsilon}_{el} > 1. \end{cases} \quad (1.75)$$

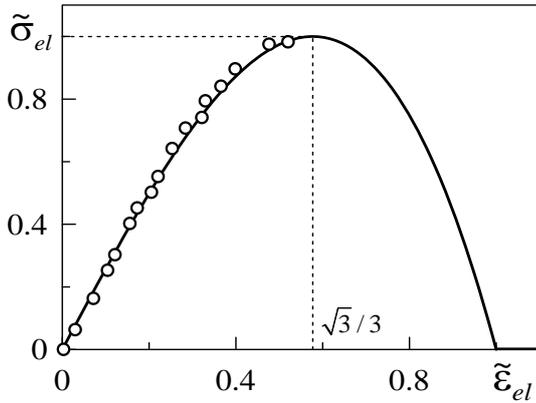


Рис. 1.25. Зависимость упругих напряжений в слое $\tilde{\sigma}_{el}$ как функция упругих деформаций $\tilde{\varepsilon}_{el}$ (1.75) [121]. \circ — экспериментальные данные из работы [157].

Согласно (1.75), напряжения $\tilde{\sigma}_{el}$ принимают максимальное значение $\tilde{\sigma}_{el} = 1$ при деформациях $\tilde{\varepsilon}_{el}^* = \sqrt{3}/3$, а затем убывают до нуля. Зависимость (1.75) показана на рис. 1.25. Также на указанном рисунке представлены экспериментальные результаты, приведенные в работе [157]. Следует отметить, что экспериментально такую зависимость можно получить только до значения деформации, соответствующей максимуму сдвиговых напряжений, потому как убывающая ветвь зависимости $\tilde{\sigma}_{el}(\tilde{\varepsilon}_{el})$

отвечает неустойчивым состояниям системы. При воздействии на смазочный слой при постепенном повышении сдвиговых напряжений при превышении критического значения, которое задается уравнением (1.73), слой теряет сдвиговую устойчивость. Поэтому для анализа дальнейшей динамики смазочного слоя в рассмотрение необходимо ввести пластическую деформацию.

1.5.2.2. Пластические и вязкие свойства смазочного слоя

Упругую деформацию в смазочном слое можно представить как разность между полной деформацией ε и пластической ε_{pl} :

$$\varepsilon_{el} = \varepsilon - \varepsilon_{pl}. \quad (1.76)$$

При изменении пластической деформации во времени в слое возникают вязкие напряжения σ_v (ср. с (1.54)):

$$\sigma_v = \eta \dot{\varepsilon}_{pl}, \quad (1.77)$$

где коэффициент пропорциональности η — это динамическая вязкость. Полное напряжение определится как сумма упругой и вязкой компонент:

$$\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v. \quad (1.78)$$

В упруго деформированном состоянии возможно наличие пластического течения за счет термоактивированного зарождения дефектов, энергия которых U_0 обратно пропорциональна действующему напряжению [121]

$$U_0 = \frac{A(T)}{\sigma}. \quad (1.79)$$

Из выражения (1.79) следует, что с повышением напряжений потенциальный барьер U_0 снижается, и смазка становится более жидкой (эффект сдвигового плавления). С преодолением барьера (1.79) скорость движения дислокаций увеличивается, поскольку она уже определяется вязким трением, которое в свою очередь обусловлено взаимодействием с фононами и электронами [158], и приблизительно пропорционально действующим напряжениям. При этом макроскопическая скорость пластической деформации задается законом вида [121]

$$\dot{\varepsilon}_{pl} \propto \sigma \exp \left\{ -\frac{A(T)}{\sigma k_B T} \right\}, \quad (1.80)$$

где k_B — постоянная Больцмана. Выражение (1.80) показывает, что мы рассматриваем идеально упругое тело в том смысле, что скорость пластической деформации обращается в нуль при нулевых напряжениях $\sigma = 0$. С другой стороны, при напряжениях $\sigma \neq 0$ согласно выражению (1.80) всегда имеется конечная скорость пластической деформации. Коэффициент $A(T)$ обращается в нуль

при критической температуре $T = T_c$ [121]. Это означает, что в точке перехода из твердого в жидкое состояние (при $\varepsilon = \varepsilon_{el,c}$) скорость пластической деформации меняется непрерывно. Поэтому для качественного анализа предположим, что упругая и пластическая деформации вблизи точки перехода связаны линейным релаксационным соотношением [121]

$$\dot{\varepsilon}_{pl} = \frac{\varepsilon_{el}}{\tau_\varepsilon}, \quad (1.81)$$

где введен феноменологический коэффициент τ_ε , имеющий смысл характерного времени релаксации внутренних напряжений (максвелловское время релаксации).

1.5.2.3. Переход слоя из упругого в вязкое состояние

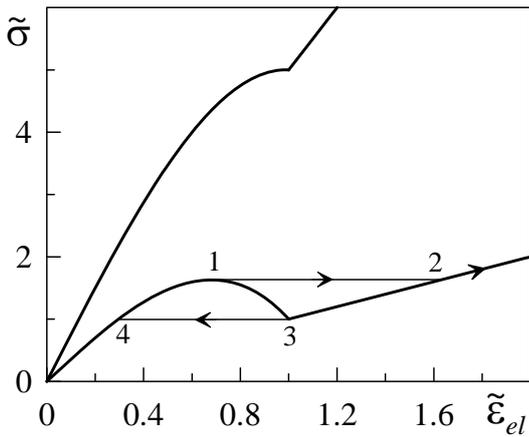


Рис. 1.26. Зависимости напряжений $\tilde{\sigma}$ от сдвиговой деформации $\tilde{\varepsilon}_{el}$ (1.83) в смазочном слое, претерпевающем фазовый переход плавления. Верхняя кривая отвечает большой вязкости $\tilde{\eta} = 5$ (1.84), нижняя — малой вязкости $\tilde{\eta} = 1$ (1.84) [121].

Комбинируя соотношения (1.68), (1.77), (1.78) и (1.81), получим выражение

$$\sigma = \mu\varepsilon_{el} + \frac{\eta}{\tau_\varepsilon}\varepsilon_{el}, \quad (1.82)$$

которое в безразмерном виде с использованием единиц измерения (1.74) запишется в виде

$$\tilde{\sigma} = \begin{cases} \frac{3\sqrt{3}}{2} (1 - \tilde{\varepsilon}_{el}^2) \tilde{\varepsilon}_{el} + \tilde{\eta}\tilde{\varepsilon}_{el}, & \tilde{\varepsilon}_{el} < 1, \\ \tilde{\eta}\tilde{\varepsilon}_{el}, & \tilde{\varepsilon}_{el} > 1, \end{cases} \quad (1.83)$$

где введена безразмерная вязкость

$$\tilde{\eta} = \frac{\eta}{\tau_\varepsilon\sigma_0/\varepsilon_{el,c}}. \quad (1.84)$$

График зависимости (1.83) приведен на рис. 1.26 для двух значений вязкости, соответствующих различным сценариям сдвигового плавления. В случае малой вязкости (нижняя кривая) при повышении напряжениями критического значения в точке 1 происходит скачкообразное плавление и система переходит в точку 2, которая соответствует

вязкому течению с нулевыми упругими напряжениями. При дальнейшем повышении напряжений скорость деформации линейно нарастает. Если после указанного перехода уменьшать напряжения, смазочный слой остается в жидком состоянии до точки 3, в которой происходит скачкообразное затвердевание с переходом системы в точку 4. При большом значении вязкости η (или малом времени релаксации τ_ε) зависимость $\dot{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_{el})$ может не иметь экстремумов, что показывает верхняя кривая на рис. 1.26. В таком случае происходит непрерывное плавление, что соответствует монотонному возрастанию скорости пластической деформации с ростом напряжений. Такое объяснение приведено в работе [121], основываясь на внешнем виде кривых, приведенных на рис. 1.26.

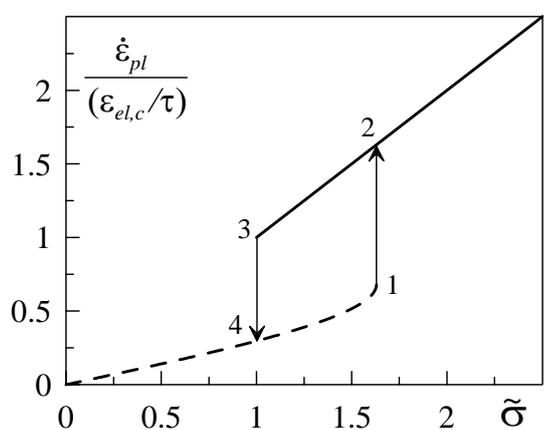


Рис. 1.27. Скорость пластического течения $\dot{\varepsilon}_{pl}$ как функция напряжений $\tilde{\sigma}$ при нагрузке и разгрузке слоя, полученная из (1.81) и (1.82) [121].

На рис. 1.27 показана зависимость скорости пластического течения $\dot{\varepsilon}_{pl}$ смазочного слоя от полных действующих напряжений $\tilde{\sigma}$. Фактически рисунок показывает, что с ростом величины полных напряжений увеличивается скорость V относительного движения трущихся поверхностей. Причем нулевые напряжения $\tilde{\sigma} = 0$ соответствуют состоянию покоя, поскольку в этом случае $V = 0$. Стоит отметить, что описанное в данном подразделе диссертации гистерезисное поведение граничной смазки

наблюдалось ранее экспериментально [157, 159], а так же в результате компьютерного моделирования [160].

1.5.2.4. Скорость пластического течения как функция температуры вблизи точки фазового перехода

Покажем, что флуктуации параметра порядка вблизи точки фазового перехода приводят к наличию "упругих" напряжений в жидкой фазе выше температуры перехода. Усредняя выражение (1.68), получим флуктуационный вклад в напря-

жения в виде

$$\sigma_{el, \text{fluct}} = \langle \varphi^2 \rangle \varepsilon_{el}. \quad (1.85)$$

Среднее значение квадрата параметра порядка вне флуктуационной области в жидкой фазе запишется как [21, 121]:

$$\langle \varphi^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle |\varphi_k|^2 \rangle \frac{Ldk}{2\pi}. \quad (1.86)$$

Используя разложение (1.67), можно записать [21, 121]

$$\langle |\varphi_k|^2 \rangle = \frac{k_B T}{2L [\alpha (T - T_c) + gk^2]}, \quad (1.87)$$

где L — протяженность системы в направлении сдвига, а k_B — постоянная Больцмана. Уравнения (1.85)–(1.87) определяют вклад флуктуаций в полные напряжения выше точки фазового перехода. Аналогичный вклад имеется также и ниже точки фазового перехода. При наличии внешних напряжений флуктуации в перпендикулярных сдвигу направлениях подавляются в силу нарушения симметрии. Поэтому интегрирование в (1.86) производится по единственной компоненте волнового вектора в направлении сдвига. После подстановки выражения (1.87) в (1.86), получим

$$\langle \varphi^2 \rangle = \frac{k_B T}{4\sqrt{g\alpha (T - T_c)}}. \quad (1.88)$$

Стоит отметить, что флуктуации силы трения носят различный характер при ”прямом“ и ”обратном“ переходах. Дело в том, что при увеличении напряжений деформация ε_{el} изменяется скачком от значения, соответствующего максимуму напряжений в упругом состоянии, до значения, соответствующего вязкому течению слоя (см. рис. 1.26), и смазочный слой при этом никогда не находится вблизи точки фазового перехода. При уменьшении напряжений наблюдается иная ситуация, поскольку затвердевание слоя происходит в точке, которая соответствует фазовому переходу в упругое состояние. Вблизи этой точки флуктуации должны аномально возрастать, а в самой точке перехода наблюдаться масштабная инвариантность флуктуаций [21].

При температуре выше температуры фазового перехода напряжения запишутся как

$$\sigma = \langle \varphi^2 \rangle \varepsilon_{el} + \frac{\eta}{\tau_\varepsilon} \varepsilon_{el} = \left[\frac{k_B T}{4\sqrt{g\alpha}(T - T_c)} + \frac{\eta}{\tau_\varepsilon} \right] \varepsilon_{el}, \quad (1.89)$$

либо с учетом (1.81)

$$\dot{\varepsilon}_{pl} = \frac{\sigma}{\eta} \times \frac{1}{1 + \sqrt{t_0/(T - T_c)}}, \quad (1.90)$$

где введена постоянная

$$t_0 = \frac{(\tau_\varepsilon k_B T_c)^2}{16\eta^2 g\alpha}. \quad (1.91)$$

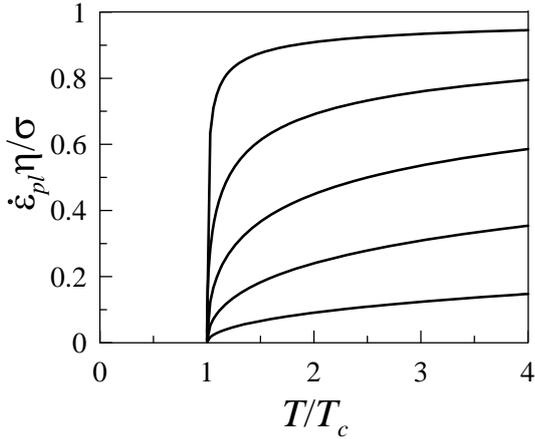


Рис. 1.28. Скорость пластического течения как функция температуры [121]. Кривые, расположенные сверху вниз, соответствуют значениям $t_0 = 0,01; 0,2; 1,5; 10; 100$ соответственно.

Зависимость (1.90) показана на рис. 1.28. Подобные зависимости показывают также и компьютерные эксперименты [160]. Рис. 1.28 показывает, что при превышении температурой критического значения в системе начинается направленное движение. На этой идее основана реологическая модель, предложенная в работе [161] и развитая в кандидатской диссертации Манько Н. Н. [162].

1.6. Выводы к разделу 1

Проведенный анализ литературных источников позволяет сделать следующие выводы.

1. На сегодняшний день существует большое количество экспериментальных данных по исследованию граничного трения. Исследуется влияние температуры, внешней нагрузки, скорости сдвига, и многих других факторов. Несмотря на это, до сих пор не существует единого подхода, который способен был бы описать все наблюдаемые эффекты, такие как сдвиговое разжижение, фазовые переходы, эффекты памяти, различные типы прерывистого движения, и т.д. Это связано со сложностью физико-химических процессов, протекающих в зоне контакта

при трении. В предлагаемой диссертационной работе предложена феноменологическая теория фазовых переходов, позволяющая описать большинство экспериментально наблюдаемых эффектов при трении в режиме граничной смазки.

2. В связи с востребованностью нанотрибологических систем в компьютерных запоминающих устройствах, системах позиционирования в микроэлектронике и в аэрокосмической промышленности, а также с растущей миниатюризацией механических систем, в последние годы растет актуальность их теоретического и экспериментального исследования. Несмотря на это, процессы, проходящие в зоне контакта, достаточным образом не изучены, поэтому в каждом конкретном случае приходится проводить дорогостоящие эксперименты, что повышает себестоимость готовой продукции. Теоретическое описание граничного режима позволит свести к минимуму количество необходимых экспериментов.

3. Помимо прикладного значения, исследование граничного режима трения имеет также и фундаментальное, поскольку позволяют существенно продвинуться в понимании процессов, проходящих в зоне контакта, которые на сегодняшний день прямыми методами не наблюдаются. Одним из активно развивающихся направлений является исследование граничного режима трения между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями при наличии между ними однородного смазочного слоя толщиной в несколько нанометров. Именно такая ситуация рассматривается в большей части настоящей диссертационной работы.

РАЗДЕЛ 2

ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ КИНЕТИЧЕСКИМИ РЕЖИМАМИ ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ

В подразделе 1.5 литературного обзора описана предложенная В. Л. Поповым термодинамическая модель граничного трения, в которой переходы между структурными состояниями смазочного материала представлены как фазовые переходы второго рода [121]. Однако, в экспериментах по изучению граничного режима трения часто наблюдаются фазовые переходы первого рода [12, 19, 163, 164], являющиеся причиной возникновения в системе прерывистого режима движения, который является одной из основных причин преждевременного износа и разрушения трущихся деталей в наноразмерных механизмах. Поэтому понимание причин возникновения такого режима является важной задачей не только с фундаментальной, но и с практической точки зрения. Возможность скачкообразного фазового перехода первого рода автор работы [121] обсуждает в [154], однако не проводит соответствующего исследования. Целью данного раздела диссертации является обобщение модели на фазовый переход первого рода и описание поведение трибологических систем двух типов на основе такой модификации. Также здесь получены и описаны кинетические зависимости основных параметров трибологической системы, подробно изучен и описан механизм возникновения прерывистого режима движения, особенности гистерезисных явлений при изменении управляющих параметров системы (в рассматриваемом случае это скорость сдвига и температура смазочного материала), периодическое внешнее воздействие на трибологическую систему, а также рассмотрены три типа смазочных материалов (ньютоновские, дилатантные и псевдопластические жидкости). На основе результатов компьютерного эксперимента описаны условия, при которых трение уменьшается и пропадает прерывистый режим. Фазовый переход первого рода рассматривается в рамках двух типов разложения свободной энергии по степеням параметра порядка (симметричный и несимметричный потенциал).

2.1. Обоснование методики исследований

Функционал Гинзбурга – Ландау. Основным моментом теории фазовых переходов Ландау является правильный выбор функционала Гинзбурга – Ландау, который является функцией параметра порядка. Для его построения в каждом конкретном случае сперва необходимо записать микроскопический гамильтониан, описывающий все взаимодействия между частицами, из которых состоит рассматриваемая система. Это могут быть как атомы, так и макроскопические частицы в случае описания коллоидных систем [165, 166]. Как правило, записанный таким образом гамильтониан имеет сложный вид, однако из него можно получить выражение для свободной энергии в виде разложения Ландау. Использование такого разложения позволяет описывать кинетику фазового перехода при изменении управляющих параметров типа давления, температуры, а в нашем случае еще и скорости сдвига трущихся поверхностей. К примеру, в работе [167], исходя из микроскопического строения вещества, получен функционал Гинзбурга – Ландау для перехода жидкость-пар.

Однако, даже проводя описание исходя из микроскопических представлений, невозможно однозначно определить константы функционала Гинзбурга – Ландау, на них можно лишь наложить некоторые ограничения. Здесь важно, чтобы полученный функционал был из данного "класса универсальности", а конкретные константы в конечном итоге можно определить только из сравнения с экспериментальными данными, такими как критические температуры (давления), радиус спада суммарных взаимодействий, ширина флуктуационной области, критические индексы [168] и т.п. В конечном счете при решении каждой конкретной задачи нужно правильно выбрать степенные слагаемые в разложении свободной энергии по параметру порядка, которые отражают такие свойства, как симметрия эффективного функционала и тип фазового перехода (первого либо второго рода), взаимодействие параметра порядка с другими подсистемами (параметрами порядка), наличие или отсутствие дальнего действия (которое возникает за счет упругости решетки, теплопроводности, электромагнитных полей, и т.п.).

Однако, существует также и чисто феноменологический подход, в котором разложение Ландау можно определить непосредственно из эксперимента. Связано это прежде всего с тем, что свободную энергию можно вычислить в численном эксперименте. В обзоре [169] описываются фазовые переходы в системах с ограниченной геометрией ("*confined systems*"). В таких системах изучаемое вещество (в нашем случае смазочный слой) ограничено твердой поверхностью (у нас это поверхности трения) из другого материала, который, как правило, обладает большей температурой плавления, поэтому не изменяет свою структуру при плавлении ограниченного им вещества. Если толщина материала, свойства которого изучаются, составляет несколько атомарных диаметров, при его плавлении на симметрию состояния существенное влияние оказывает атомарный рельеф ограничивающих стенок, которые остаются твердыми. Более того, за счет тонкости разграничивающего слоя ограничивающие стенки также взаимодействуют между собой, что влияет на кинетику системы при их взаимном перемещении. К примеру, в работе [169] показано, что в материалах с наноразмерными порами на состояние находящихся в поре жидкостей влияет структура поры. Жидкость, в зависимости от геометрии поры, может принимать как жидкую, так и твердую структуру, между которыми при внешнем механическом воздействии возможен переход. Такие структуры не являются равновесными термодинамическими фазами, и быстро релаксируют при выдавливании из поры. В работе [170] в результате компьютерного моделирования получены зависимости свободной энергии Ландау для наноразмерного слоя метана, находящегося внутри графитовой поры, показанные на рис. 2.1. При этом свободная энергия $\Phi(\varphi)$ является функцией параметра порядка φ , который представляет обобщенную функцию плотности, принимающую различные значения в различных фазах. Также параметр φ ассоциируется с эффективными ориентационными связями между атомами [170]. Вычислялась свободная энергия как

$$\Phi(\varphi) = -k_B T \ln [P(\varphi)] + \text{const}, \quad (2.1)$$

где $P(\varphi)$ – вероятность нахождения системы в состоянии, которому отвечает

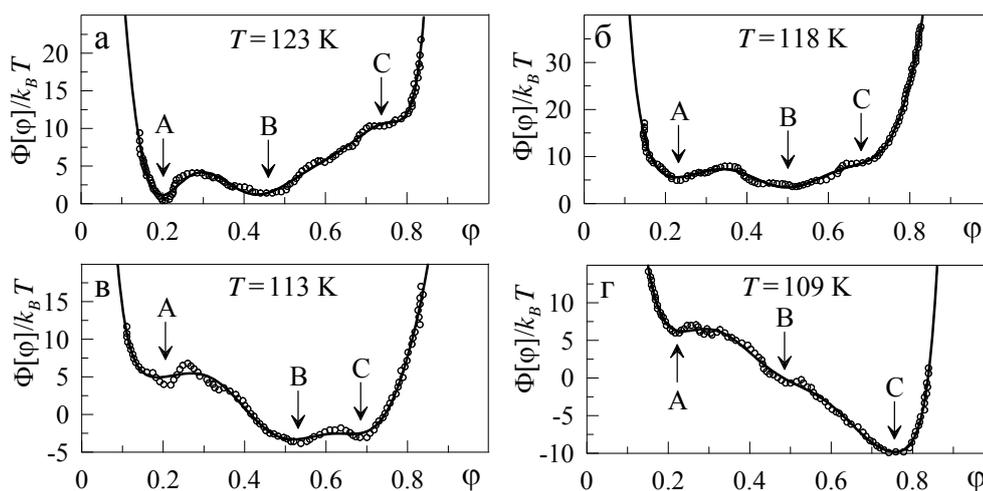


Рис. 2.1. Свободная энергия Ландау (2.1) как функция параметра порядка φ для метана, ограниченного стенками графитовой поры для температур: (а) $T = 123$ К; (б) $T = 118$ К; (в) $T = 113$ К; (г) $T = 109$ К [170].

значение параметра порядка между φ и $\varphi + \delta\varphi$. Это функция предполагает бимодальное распределение, когда реализуется двухфазное сосуществование. Относительная высота пиков вероятности по отношению друг к другу предоставляет информацию о том, которая из фаз является более устойчивой в термодинамическом смысле. Показанные на рис. 2.1 зависимости иллюстрируют три устойчивые фазы: фаза А соответствует случаю, когда все слои метана находятся в жидком состоянии; фаза В — это ситуация, когда контактные слои (слои, прилегающие к двум стенкам пор) заморожены, а остальные имеют жидкую структуру; в фазе С все слои метана заморожены. В работе показано, что переходы между указанными фазами представляют фазовые переходы первого рода. В то время как температура замерзания объемного метана составляет порядка 101 К, температуры переходов $T_{B-C} \approx 114,5$ К и $T_{A-B} \approx 124,4$ К [170]. Таким образом, в системах с ограниченной геометрией вещество ведет себя аномальным образом — изменяются температуры, при которых осуществляются фазовые переходы, и дополнительно появляются новые стационарные состояния. На рис. 2.1 сплошными линиями показаны полиномиальные аппроксимации 10-й степени, полученные методом наименьших квадратов. Несмотря на высокую степень аппроксимации, кривые неудовлетворительно описывают данные компьютерного эксперимента. К примеру, на рис. 2.1 в данные измерений показывают, что фаза С является устой-

чивой (соответствует минимуму потенциала (2.1)), в то время как аппроксимация показывает лишь перегиб зависимости $\Phi(\varphi)$. Это говорит о том, что даже 10 степени недостаточно для описания такой системы. Однако, если при аппроксимации существенно увеличить количество точек, соответствующих экстремумам потенциала $\Phi(\varphi)$ (2.1), для его описания вполне хватит полинома 6-й степени, поскольку на зависимости реализуются 3 минимума и 2 максимума потенциала.

Имея набор зависимостей $\Phi(\varphi)$ для различных температур, для каждой из них можно найти аналитическую функцию, и проследить зависимости коэффициентов при членах разложения по степеням параметра порядка от температуры. Часто такие зависимости коэффициентов можно описать полиномиальными функциями. После указанной процедуры мы получим свободную энергию $\Phi(\varphi, T)$, основываясь на которой можно строить термодинамическую теорию фазовых переходов, позволяющую описывать кинетику процесса. Такая аппроксимационная процедура, позволяющая получить трехмерную зависимость, применялась нами в работе [27]. Таким образом, при численном моделировании также встает проблема правильного выбора полиномиальных конструкций. Рассмотренный пример показывает, что функционал Гинзбурга — Ландау для систем с ограниченной геометрией существенно отличается от функционала для объемных систем, состоящих из тех же веществ, что значительно усложняет микроскопическое рассмотрение задачи, но с другой стороны не обязательно для описания таких систем исходить из микроскопического подхода, поскольку можно непосредственно руководствоваться экспериментальными данными, либо данными компьютерного моделирования, что и проводится далее в настоящей диссертационной работе. К тому же, со времени создания теории фазовых переходов Ландау сложилась традиция решать каждую новую проблему, сконструировав простейший функционал из соображений симметрии, радиусов и масштабов взаимодействия подсистем.

Параметр порядка. Прежде чем строить модель фазовых переходов, необходимо определиться с параметром, который определяет фазовые состояния системы. В диссертационной работе мы рассматриваем модель граничного трения двух атомарно-гладких твердых поверхностей, разделенных смазочным матери-

алом, имеющим толщину в несколько атомарных диаметров. Существует много работ, в которых плавление в таких системах рассматривается из микроскопических представлений, например, работы Мартина Шоена [171–177]. В этих работах показано, что наличие ограничивающих стенок приводит к вынужденному упорядочению зажатого между ними материала и возникновению в нем модуляции плотности по толщине слоя. На рис. 2.2 показана микроскопическая плотность цепных молекул n -декана, зажатых между гладкими поверхностями, как функция вертикальной координаты. Непосредственно у ограничивающих поверх-

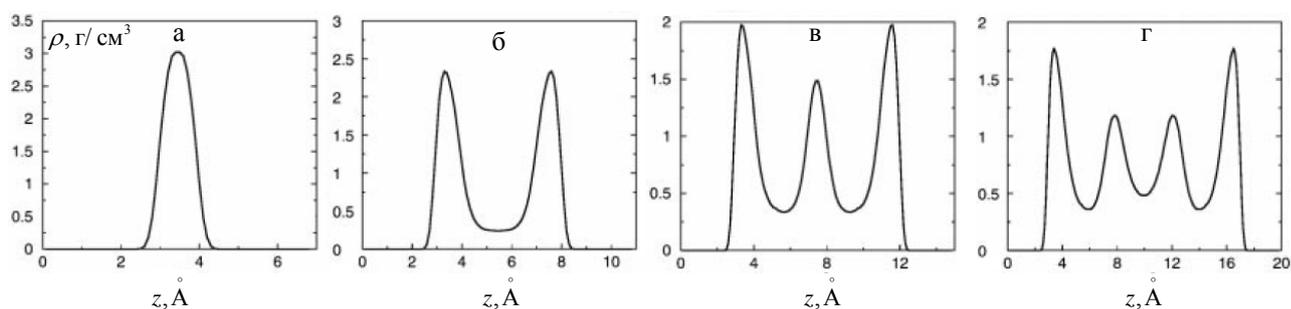


Рис. 2.2. Распределение локальной функции плотности по толщине для однослойного (а), двухслойного (б), трехслойного (в) и четырехслойного (г) n -декана [171].

ностей функция плотности принимает бóльшие значения, что характерно для подавляющего большинства систем. Причем модуляция плотности для таких систем существует не только в нормальном направлении, но и в направлении сдвига ограничивающих поверхностей. Это приводит к возможности двух последовательных фазовых переходов ”плавления“ при сдвиге. При первом переходе модуляция плотности исчезает в направлении сдвига, что соответствует одномерному плавлению, а при втором переходе она исчезает и в нормальном направлении, после чего наступает полное плавление смазочного материала. Такое поведение показывают многие компьютерные эксперименты, например [160]. Это позволяет при построении разложения Ландау параметру порядка φ придать смысл амплитуды периодической части микроскопической функции плотности среды, исчезающей при плавлении материала [121]. Стоит отметить, что неравномерное распределение плотности в слоях с ограниченной геометрией также показывают и результаты компьютерного моделирования [178, 179].

Свободная энергия для описания плавления сдвигом. Как уже указывалось выше, не во всех случаях удастся записать микроскопический гамильтониан, и часто для построения модели фазовых переходов используются известные разложения свободной энергии, основываясь на экспериментальных данных. Например, в работе [180] строится теория фазовых переходов для описания индуцированного сдвигом порядка-беспорядка, который наблюдается экспериментально в сплавах $\text{Ge}_x\text{Sb}_{1-x}$. В работе используются разложения вида

$$\Phi_{gl} = \frac{\bar{A}}{2} (V'_a - V') \varphi^2 - \frac{\bar{B}}{3} \varphi^3 + \frac{\bar{C}}{4} \varphi^4, \quad (2.2)$$

$$\Phi_{dm} = \frac{A'}{2} (V'_a - V') \varphi^2 - \frac{C'}{4} \varphi^4 + \frac{D'}{6} \varphi^6, \quad (2.3)$$

где V' – объем системы, V'_a – критическое значение объема, выше которого кристаллическое состояние становится неустойчивым. В выражениях (2.2), (2.3) отсутствуют температурные вклады, поскольку исследование проводилось при фиксированной температуре. При выборе потенциала Φ авторы работы [180] основываются на том, что в эксперименте наблюдается фазовый переход первого рода, и на соображениях симметрии. Причем в [180] присутствуют эксперимент, теория, и компьютерное моделирование. Все полученные результаты совпадают. Параметр порядка для системы $\text{Ge}_x\text{Sb}_{1-x}$ изначально ассоциируется с микроскопической плотностью. Показано, что таким образом введенный параметр порядка φ пропорционален интенсивности пиков Рамановских спектров, наличие которых говорит о кристаллическом состоянии вещества. Таким образом, параметр порядка можно связывать с непосредственно наблюдаемой в эксперименте величиной. Так, в разделах 5 и 6 диссертационной работы нами как параметр порядка выбирается избыточный объем, возникающий при плавлении смазочного материала, который легко определить, зная площадь контакта A и толщину смазочного слоя h до и после плавления. Разложение типа (2.2) использовалось также для описания фазовых переходов в ограниченных наноразмерных слоях жидких кристаллов [181, 182], а с помощью симметричного разложения (2.3) изучалась аморфизация твердого тела при его плавлении [183], где также проводилось сравнение с компьютерным моделированием. В настоящей диссертационной работе

нами используются оба разложения (2.2) и (2.3). Связано это с тем, что системы, работающие в режиме граничного трения, весьма разнообразны. В качестве смазочных материалов используются как симметричные квазисферические молекулы типа ОМЦТС, так и длинные линейные и разветвленные цепные полимерные молекулы. Более того, на таких масштабах ориентация поверхностей трения также играет большую роль, и от этого будет зависеть вид используемого разложения. В некоторых ситуациях процессы, происходящие при трении, не зависят от направления движения, в иных изменение направления критическим образом влияет на состояние смазочного материала (например *ratchet* системы). В случае, когда параметр порядка ассоциирован с координатой, к примеру, как в работе [166], первый случай будет описываться симметричным, а второй — несимметричным потенциалом. Поскольку в зависимости от рассматриваемых процессов в одной и той же задаче параметру порядка можно придать различный смысл, как это было показано в работе [180], мы должны рассмотреть обе ситуации.

В разделах 3 и 5 диссертации рассматривается разложение типа (2.2), в котором дополнительно учтено линейное слагаемое по параметру порядка φ . Такой специфический случай описан в работах [184–186], и соответствует влиянию на систему внешнего либо внутреннего поля. Внутреннее поле в таких системах создается при использовании в качестве смазок длинных полярных дипольных молекул, концы которых ”прилипают“ к поверхностям за счет адгезионных сил, и после упорядочения молекул за счет движения трущихся поверхностей на них создаются разноименные электрические заряды, создающие электрическое поле. Также не исключено и влияние более сильного внешнего электрического поля, поскольку рассматриваемые системы активно используются в электронике и аэрокосмических устройствах [12].

В диссертации рассмотрена связь между подходами, в которых в качестве параметра порядка выбираются модуляция плотности и избыточный объем. Показано, что при переходе от одного параметра порядка к другому термодинамический потенциал изменяет свой вид. Это еще раз говорит о том, что вид разложения зависит от физического содержания выбираемого параметра порядка.

Численное сравнение с экспериментом.

Фундаментом для диссертационной работы являются работы В. Л. Попова [121, 151] (см. подраздел 1.5 литературного обзора), в которых впервые применена теория Ландау фазовых переходов второго рода для описания структурных состояний смазочного материала в режиме граничного трения. Поэтому адекватность подхода, предложенного в [121, 151], оказывает непосредственное влияние на все полученные в диссертации результаты. Здесь стоит отметить, что в работах [129, 187] авторами с использованием методов молекулярной динамики проводится моделирование поведения зажатых между гладкими твердыми поверхностями слоев смазочного материала толщиной в несколько атомов. Полученные в указанных работах зависимости напряжений от деформации, а также зависимости модуля сдвига смазки от сдвиговых деформаций в точности повторяет зависимости, полученные в [121] в рамках фазового перехода второго рода. В другой теоретической работе [188] авторами в результате моделирования получены пространственные распределения локальной плотности атомов (в нашем представлении периодическая часть такой плотности выбрана как параметр порядка) и показано, что с ростом температуры периодическая часть исчезает, что приводит к плавлению смазки. Именно это и утверждается в нашей работе. Более того, экспериментальные данные, приведенные в работе [157] также совпадают с полученными в модели [121] зависимостями напряжений от деформации. Таким образом, построенные в диссертации модели и полученные на их основе результаты основываются на теории, которая неоднократно подтверждалась как с привлечением методов компьютерного моделирования, так и непосредственно в экспериментах. Кроме того, практически все результаты в той или иной степени сравниваются с имеющимися экспериментальными данными, поскольку целью работы является не описание новых физических явлений, а построение теории граничного трения, которая способна описать широкий класс экспериментально наблюдаемых явлений. Исследование проведено в размерных переменных, которые в реальных системах могут изменяться в широком диапазоне параметров, поэтому мы в большинстве случаев ограничиваемся качественным уровнем описания.

2.2. Фазовый переход первого рода (симметричный потенциал)

2.2.1. Основные уравнения и прерывистый режим при сдвиге поверхностей в одну сторону

2.2.1.1. Свободная энергия

Для описания фазового перехода первого рода модифицируем разложение плотности свободной энергии в виде (ср. с (1.67))

$$\Phi = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{2}\varphi^4 + \frac{c}{3}\varphi^6 + \frac{g}{2}(\nabla\varphi)^2, \quad (2.4)$$

где T — температура смазочного материала, T_c — критическая температура, ε_{el} — сдвиговая компонента упругой деформации, α, a, b, c, g — положительные постоянные, φ — параметр порядка, представляющий амплитуду периодической части микроскопической функции плотности среды [121]. Параметр φ равен нулю в жидкоподобной фазе, и принимает ненулевое значение в твердоподобной. В потенциале (2.4) по сравнению с (1.67) изменен знак третьего слагаемого и добавлено четвертое. Такой вид разложения применяется при описании фазовых переходов первого рода [154]. Также в (2.4) во втором слагаемом дополнительно введен множитель a . Это позволяет варьировать вклад в потенциал упругой энергии. В работе [121] квадрат параметра порядка φ^2 численно равен модулю сдвига смазочного материала μ . Это формально не позволяет применять теорию к низкоразмерным трибологическим системам с толщиной смазок в несколько атомарных диаметров [189], поскольку такие смазки за счет сдавливания поверхностей трения обычно образуют упорядоченные структуры, характеризующиеся большим значением модуля сдвига, иногда на несколько порядков больше, чем для объемных смазок аналогичного типа [12, 190]. В случае $\mu = \varphi^2$ большое значение модуля сдвига μ в рамках модели не может быть достигнуто, поскольку разложение (2.4) справедливо в области $\varphi^2 < 1$.

Определим согласно (2.4) упругие напряжения как $\sigma_{el} = \partial\Phi/\partial\varepsilon_{el}$:

$$\sigma_{el} = a\varphi^2\varepsilon_{el}. \quad (2.5)$$

Таким образом, с введением в разложение (2.4) коэффициента a модуль сдвига определяется выражением

$$\mu = a\varphi^2, \quad (2.6)$$

и может принимать большие значения при малых φ . Обычно в процессе трения при превышении критических величин температуры T либо упругих сдвиговых напряжений σ_{el} смазка плавится не полностью, а создается доменная структура с областями жидкостного и сухого трения. Наличие в (2.4) градиентного слагаемого позволяет учесть этот факт. Рассмотрению такой доменной структуры посвящен раздел 4 диссертационной работы. В настоящем разделе рассматривается поведение смазочного материала в рамках одного домена, обладающего однородной структурой, и везде полагается $g = 0$.

Исследуем стационарные состояния, которые описывает потенциал (2.4). Условие стационарности $\partial\Phi/\partial\varphi = 0$ приводит к корню $\varphi = 0$, описывающему нулевой экстремум, и биквадратному уравнению вида

$$\varphi^4 - \frac{b}{c}\varphi^2 + \left[\frac{\alpha(T - T_c)}{c} + \frac{a}{2c}\varepsilon_{el}^2 \right] = 0 \quad (2.7)$$

с корнями

$$\varphi_{\mp}^2 = \frac{b}{2c} \mp \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{2c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha(T - T_c)}{c}\right)}, \quad (2.8)$$

которые задают абсциссы экстремумов потенциала (2.4). При выбираемых далее числовых значениях параметров модели знак ”–“ в (2.8) отвечает симметричным максимумам потенциала, а ”+“ – его симметричным минимумам.

Несмотря на то, что микроскопическая плотность вещества может быть измерена численно (см. рис. 2.2), а значения параметра порядка φ найдены непосредственно из эксперимента, для универсальности его гораздо удобнее представить в безразмерном виде. Будем считать, что параметр порядка φ нормирован на максимальную величину, и за счет этого принимает значения от 0 до 1. Значение $\varphi = 1$ отвечает максимально упорядоченной смазке, что согласно уравнению (2.8) соответствует нулевым температурам $T = 0$ и скоростям сдвига $V = 0$. Уравнение (2.8) совместно с условием $\varphi_{\max} = 1$ при $T = 0$ и $V = 0$ приводит к

связи параметров разложения в виде

$$c - b - \alpha T_c = 0, \quad (2.9)$$

т.е. на них накладываются дополнительные ограничения. В следующем подразделе диссертации записываются выражения для температур и скоростей, при которых смазочный материал затвердевает и плавится. При наличии точно измеренных указанных величин все параметры разложения (2.4) также определяются точно. Но для этого необходим отсутствующий на сегодняшний день в литературе специфический набор экспериментальных данных для конкретной системы. Тем более, нашей целью является качественный уровень описания экспериментально наблюдаемых эффектов. По этим причинам не будем привязываться к конкретной системе, а выберем параметры таким образом, чтобы значения критических температур и скоростей находились в диапазоне экспериментально наблюдаемых параметров [12]. Однако, при этом будем выбирать параметры разложения таким образом, чтобы они удовлетворяли уравнению (2.9).

Вид потенциала (2.4) будет зависеть от значения подкоренного выражения в (2.8). При выполнении условия²

$$\frac{a}{2c} \varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha (T - T_c)}{c} \leq 0 \quad (2.10)$$

реализуются два симметричных ненулевых минимума потенциала, разделенные единственным нулевым максимумом (нижняя кривая на рис. 2.3), что соответствует твердоподобной смазке. В промежуточном диапазоне значений

$$0 < \frac{a}{2c} \varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha (T - T_c)}{c} < \left(\frac{b}{2c} \right)^2 \quad (2.11)$$

нулевой максимум потенциала трансформируется в минимум, и дополнительно появляются два симметричных максимума, отделяющие центральный минимум от двух симметричных ненулевых минимумов (средняя кривая на рис. 2.3). В такой ситуации смазка может иметь как твердоподобную, так и жидкоподобную структуру, в зависимости от начальных условий.

²Здесь и далее отрицательные значения параметра порядка φ не имеют физического смысла, поэтому не рассматриваются. Однако, как например в случае симметричного разложения (2.4), потенциал четный, а поскольку наблюдаемой величиной является квадрат параметра порядка φ^2 , нет необходимости откидывать отрицательную область $\varphi < 0$.

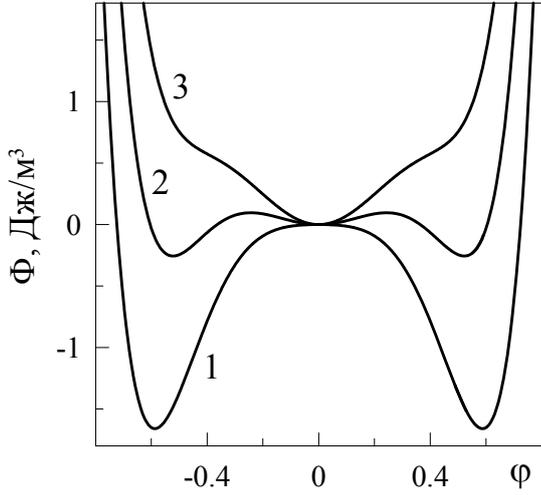


Рис. 2.3. Зависимость плотности свободной энергии Φ (2.4) от параметра порядка φ при $\alpha = 0,5 \text{ Дж}\cdot\text{К}^{-1}/\text{м}^3$, $T_c = 290 \text{ К}$, $b = 72 \text{ Дж}/\text{м}^3$, $c = 217 \text{ Дж}/\text{м}^3$. Кривые 1–3 соответствуют температурам $T = 288, 297, 305 \text{ К}$ и сдвиговой деформации $\varepsilon_{el} = 0$.

И в последнем возможном случае

$$\frac{a}{2c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha(T - T_c)}{c} \geq \left(\frac{b}{2c}\right)^2 \quad (2.12)$$

реализуется единственный нулевой минимум $\Phi(\varphi)$ (верхняя кривая на рис. 2.3), что согласно (2.6) соответствует нулевому значению модуля сдвига μ и жидкоподобной структуре смазочного материала. Согласно выражениям (2.10) – (2.12) плавление смазки осуществляется как за счет повышения ее температуры T , так и при механическом воздействии с увеличением сдвиговой компоненты упругой деформации ε_{el} . Таким образом, модель учитывает термодинамическое и сдвиговое плавление.

2.2.1.2. Стационарные состояния и фазовая диаграмма

Пусть относительная скорость сдвига трущихся поверхностей, разделенных ультратонким слоем смазки толщиной h , равна V . Для установления связи между скоростью сдвига и возникающими в слое смазки упругими деформациями воспользуемся дебаевским приближением (1.81), связывающим упругую компоненту деформации ε_{el} с пластической ε_{pl} . Полная деформация в слое определяется суммой упругой и пластической компонент [121, 191, 192]:

$$\varepsilon = \varepsilon_{el} + \varepsilon_{pl}, \quad (2.13)$$

и задает скорость движения верхнего блока V согласно связи [134]

$$V = h\dot{\varepsilon} = h(\dot{\varepsilon}_{el} + \dot{\varepsilon}_{pl}) = h\left(\dot{\varepsilon}_{el} + \frac{\varepsilon_{el}}{\tau_\varepsilon}\right), \quad (2.14)$$

где учтено выражение (1.81). Соотношение (2.14) может быть переписано в виде

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{el} = -\varepsilon_{el} + \frac{V\tau_\varepsilon}{h}. \quad (2.15)$$

При постоянном значении скорости сдвига V , согласно выражению (2.15), устанавливается стационарное значение упругой деформации

$$\varepsilon_{el}^0 = \frac{V\tau_\varepsilon}{h}. \quad (2.16)$$

Согласно принципу минимума энергии система при любых начальных условиях стремится занять состояние, соответствующее минимуму потенциала $\Phi(\varphi)$ (см. рис. 2.3). При этом устанавливается стационарное значение параметра порядка, определяемое выражением (2.8), взятым со знаком "+", поскольку знак "-" в нем отвечает неустойчивым состояниям. На рис. 2.4 приведены стационарные значения квадрата параметра порядка φ_0^2 , рассчитанные согласно выражению (2.8), в котором стационарная упругая деформация ε_{el} определяется через скорость сдвига по формуле (2.16). Сплошные участки кривых отвечают

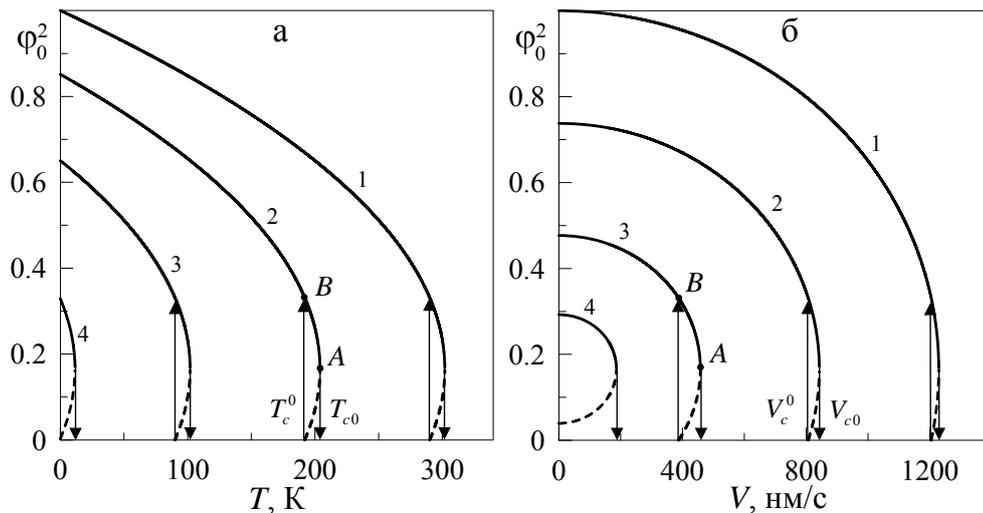


Рис. 2.4. Зависимости стационарного значения квадрата параметра порядка φ_0^2 (2.8) от температуры смазки T и скорости сдвига V при параметрах рис. 2.3 и $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$ с: (а) кривые 1–4 соответствуют скоростям сдвига $V = 0, 700, 1000, 1205$ нм/с; (б) кривые 1–4 соответствуют температурам смазки $T = 0, 160, 260, 295$ К.

устойчивым стационарным состоянием, штриховые — неустойчивым.

При нулевой скорости сдвига (сдвиговые напряжения и деформации равны нулю) и малом значении температуры T смазка твердоподобна, поскольку реализуется отличное от нуля значение параметра φ , и, согласно (2.6), модуль сдвига μ также не равен нулю (рис. 2.4а, сплошной участок кривой 1). В этом случае потенциал имеет вид, показанный нижней кривой на рис. 2.3. Критическая темпе-

ратура T_{c0} , при которой происходит плавление смазочного слоя, может быть найдена при приравнении подкоренного выражения в (2.8) к нулю, что приводит к уравнению

$$\frac{b^2}{4c} - \frac{a\varepsilon_{el}^2}{2} - \alpha(T - T_c) = 0, \quad (2.17)$$

выраженная из которого температура T и будет критической T_{c0} :

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h} \right)^2 + \frac{b^2}{4\alpha c}, \quad (2.18)$$

где вместо упругой деформации ε_{el} подставлено ее стационарное значение ε_{el}^0 (2.16). При превышении температурой T критической величины квадрат параметра порядка скачкообразно изменяется от значения³

$$\varphi_A^2 = \frac{b}{2c} \quad (2.19)$$

до нуля с переходом смазки в жидкоподобное состояние, чему соответствует верхняя кривая на рис. 2.3. Если после указанного перехода понижать T , смазка затвердевает при меньшем значении температуры T_c^0 , которое можно получить из (2.8) при $\varphi_-^2 = 0$, что приводит к уравнению

$$\frac{a}{2c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha(T - T_c)}{c} = 0, \quad (2.20)$$

температура T в котором соответствует критической T_c^0 :

$$T_c^0 = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h} \right)^2, \quad (2.21)$$

где учтено выражение $\varepsilon_{el} = V\tau_\varepsilon/h$ (2.16). При затвердевании смазочного слоя наблюдается скачек квадрата параметра порядка от нулевого значения до величины

$$\varphi_B^2 = \frac{b}{c}, \quad (2.22)$$

которая соответствует значению φ_+^2 (2.8) при подстановке температуры T_c^0 (2.21) в выражение (2.8), при этом подкоренное выражение в (2.8) равно $(b/(2c))^2$. В промежуточной области $T_c^0 < T < T_{c0}$ потенциал имеет вид, показанный средней

³Величину φ_A^2 (2.19) легко получить прямой подстановкой температуры T_{c0} (2.18) в выражение (2.8), при этом подкоренное выражение в (2.8) тождественно обращается в ноль.

кривой на рис. 2.3. Таким образом, зависимость $\varphi_0^2(T)$ имеет гистерезисный характер и соответствует фазовым переходам первого рода. Согласно рис. 2.4а, с повышением скорости сдвига V смазка плавится при меньшем значении температуры. Кривая 4 отвечает ситуации, в которой после плавления смазка уже не может затвердеть за счет понижения температуры⁴. С дальнейшим повышением скорости выше определенного критического значения смазка вне зависимости от температуры всегда жидкоподобна ($\mu = 0$)⁵. Согласно (2.18), (2.21) ширина гистерезиса по температуре

$$\Delta T = T_{c0} - T_c^0 = \frac{b^2}{4\alpha c} \quad (2.23)$$

не зависит от скорости V , что также прослеживается и на рис. 2.4а. Этот результат получен ранее в рамках модели, разработанной в [45, 53]. Однако, в указанных работах ширина гистерезиса рассчитывается численно, поскольку ввиду сложности представления не может быть определена аналитически. Согласно рис. 2.4б при превышении скоростью критического значения

$$V_{c0} = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{2ac}}, \quad (2.24)$$

которое выражается из (2.18) при $T_{c0} \equiv T$, происходит плавление смазки. Когда скорость сдвига поверхностей трения V становится меньше величины

$$V_c^0 = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}, \quad (2.25)$$

получаемой из выражения (2.21) при $T_c^0 \equiv T$, смазка затвердевает. Здесь ситуация во многом аналогична представленной на рис. 2.4а. Однако, есть и отличия, например то, что с увеличением температуры смазки растет ширина гистерезиса $\Delta V = V_{c0} - V_c^0$. Скорость и температура оказывают различное влияние на ширину гистерезиса ΔT и ΔV в связи с тем, что температура T входит в потенциал (2.4) в первой степени, а сдвиговая упругая деформация ε_{el} — во второй. Зависимости, представленные на рис. 2.4, не могут охватить всей картины, потому как являются срезом трехмерной поверхности $\varphi_{\mp}^2(V, T)$ плоскостями $V = \text{const}$ (рис. 2.4а) и $T = \text{const}$ (рис. 2.4б).

⁴Соответствующее значение критической скорости легко находится из (2.21) при $T_c^0 = 0$ или из (2.25) при $T = 0$.

⁵Соответствующая критическая скорость определяется из (2.18) при $T_{c0} = 0$, либо из (2.24) при $T = 0$.

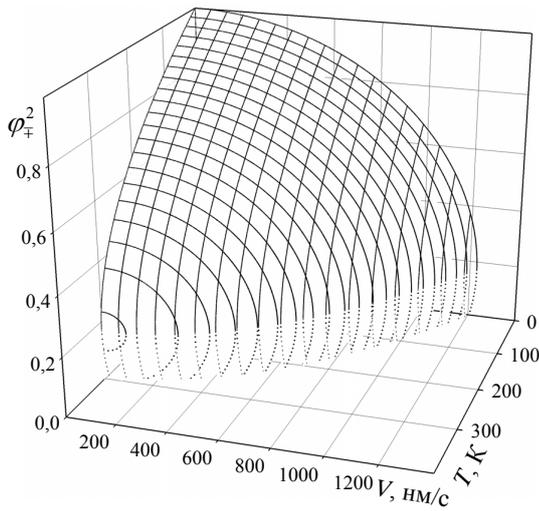


Рис. 2.5. Трехмерная зависимость стационарного значения квадрата параметра порядка φ_{\mp}^2 (2.8) от температуры T и скорости V при параметрах рис. 2.4. Сплошные линии отвечают устойчивым стационарным состояниям (минимум потенциала (2.4)), штриховые — неустойчивым (максимум потенциала).

Поэтому на рис. 2.5 дополнительно приведена трехмерная зависимость стационарного значения квадрата параметра порядка φ_{\mp}^2 от обоих управляющих параметров.

На рис. 2.6 показана зависимость критической скорости плавления V_{c0} (2.24) и затвердевания V_c^0 (2.25) смазки от ее температуры T . Выше кривой V_{c0} смазка жидкоподобна, и реализуется режим жидкостного трения SF . В области $V < V_c^0$ смазка имеет твердоподобную структуру. Между кривыми на рис. 2.6 потенциал $\Phi(\varphi)$ имеет вид, показанный средней кривой на рис. 2.3, поэтому состояние смазки в этой области является неопределенным и зависит от начальных условий. Таким образом, рис. 2.6 представляет фазовую диаграмму, на которой реализуются два стационарных режима трения. Расстояние между кривыми на рисунке по горизонтали при постоянной скорости $V = \text{const}$ представляет ширину гистерезиса ΔT (2.23), который реализуется на рис. 2.4а, а расстояние по вертикали ($T = \text{const}$) задает ширину гистерезиса ΔV на рис. 2.4б. Рис. 2.6 также можно интерпретировать как зависимость критических температур T_{c0} (2.18) и T_c^0 (2.21) от скорости сдвига V .

2.2.1.3. Сила трения

При сдвиге трущихся поверхностей в слое смазки помимо упругих σ_{el} возникают также и вязкие σ_v напряжения. Полное действующее напряжение σ определяется суммой этих двух вкладов (1.78). Сила трения F , препятствующая движению, определяется как произведение полных напряжений на площадь контакта

трущихся поверхностей A :

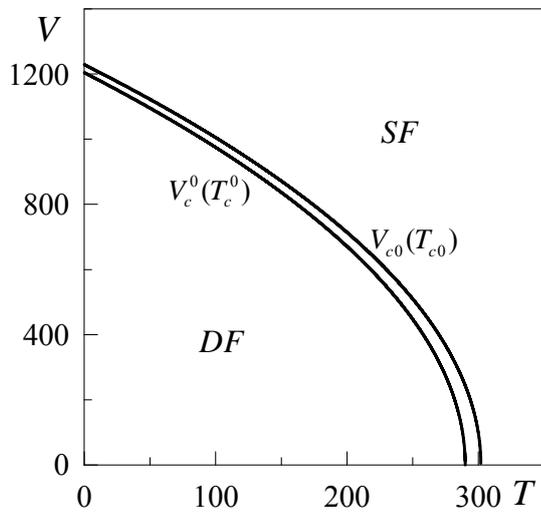


Рис. 2.6. Фазовая диаграмма с областями жидкостного (SF) и сухого (DF) трения при параметрах рис. 2.4.

$$F = \sigma A. \quad (2.26)$$

Определим вязкие напряжения в слое смазки согласно формуле [134]

$$\sigma_v = \frac{\eta_{eff} V}{h}, \quad (2.27)$$

где η_{eff} — эффективная вязкость смазочного материала [134]. Граничная смазка, как правило, представляет собой неньютоновскую жидкость. Такие жидкости имеют сложные зависимости $\eta_{eff}(\dot{\epsilon})$. Например, вязкость полимерных растворов и расплавов с ростом скорости деформирования $\dot{\epsilon}$ обычно уменьшается (псевдопластические жидкости), а в случае суспензий твердых частиц вязкость с ростом $\dot{\epsilon}$ наоборот увеличивается (дилатантные жидкости). Поэтому для качественного анализа используем простую аппроксимацию (см. подраздел 1.1.8 литературного обзора) [134]

$$\eta_{eff} = k(\dot{\epsilon})^\gamma, \quad (2.28)$$

позволяющую учесть обе ситуации. Здесь введен коэффициент пропорциональности k ($\text{Па} \cdot \text{с}^{\gamma+1}$). Согласно (2.28) для псевдопластических жидкостей $\gamma < 0$, дилатантные характеризуются показателем $\gamma > 0$, а в случае ньютоновских жидкостей $\gamma = 0$, поскольку согласно (2.28) при этом вязкость η_{eff} не зависит от градиента скорости.

С учетом (2.14) и (2.28) выражение для вязких напряжений (2.27) записывается в виде:

$$\sigma_v = k \left(\frac{V}{h} \right)^{\gamma+1}. \quad (2.29)$$

Подставляя (1.78) и (2.29) в (2.26), получим окончательное выражение для силы

трения⁶:

$$F = \left[\sigma_{el} + k \cdot \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (2.30)$$

где упругие напряжения σ_{el} определяются по формуле (2.5). Согласно теории Епифанова [193–195], увеличение силы трения при увеличении нормальной нагрузки на блок происходит за счет роста площади контакта A . Увеличение площади происходит за счет того, что смазка выдавливается из-под неровностей поверхностей, в результате чего становится возможным сцепление шероховатостей друг с другом и трение отдельных участков без смазки. В настоящей диссертационной работе рассматриваются особенности граничного трения при скольжении двух атомарно-гладких твердых поверхностей, разделенных слоем смазки с постоянной толщиной h . В таких условиях площадь контакта A приближается к площади поверхностей трения и не зависит от приложенной внешней нагрузки [196], поэтому явно нагрузка в данной модели не учитывается.

Зависимость (2.30) показана на рис. 2.7. Все кривые на рис. 2.7а соответствуют параметрам кривых на рис. 2.4а. Кривая 1 здесь отсутствует, поскольку на рис. 2.4а она построена при нулевой скорости сдвига, а в состоянии покоя сила

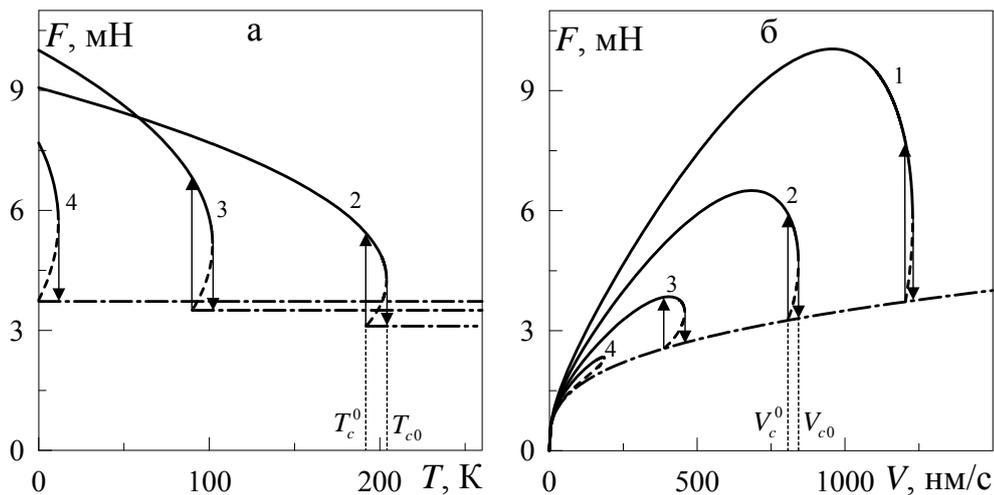


Рис. 2.7. Зависимости силы трения F (2.30) от температуры смазочного материала T и скорости сдвига V при параметрах рис. 2.4 и $\gamma = -2/3$, $A = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$, $k = 7 \cdot 10^4 \text{ Па} \cdot \text{с}^{1/3}$: (а) кривые 2–4 отвечают скоростям $V = 700, 1000, 1205 \text{ нм/с}$; (б) кривые 1–4 отвечают температурам $T = 0, 160, 260, 295 \text{ К}$.

⁶Здесь введены знаковая функция $\operatorname{sgn}(x)$ и абсолютное значение скорости сдвига $|V|$, поскольку она может принимать и отрицательные значения.

трения согласно (2.30), (2.16) равна нулю. Кривые на рис. 2.7б все соответствуют параметрам кривых на рис. 2.4б.

Рис. 2.7а показывает, что при фиксированной скорости сдвига с повышением температуры сила трения уменьшается [197]. Это происходит за счет уменьшения значения модуля сдвига μ (2.6). Когда смазка плавится ($T > T_{c0}$), сила трения от температуры не зависит, потому как в рамках рассматриваемой модели при этом модуль сдвига равен нулю. На зависимостях наблюдается гистерезис, поскольку при фазовом переходе модуль сдвига (2.6) изменяется скачкообразно. При параметрах кривой 4 в случае плавления смазка не затвердевает при последующем понижении температуры T (см. описание к рис. 2.4а), поэтому сила трения после плавления остается постоянной при любых T .

Рис. 2.7б демонстрирует несколько иное поведение. Здесь, согласно (2.30), сперва при повышении скорости V полная сила трения увеличивается за счет вклада вязких напряжений σ_v , а также за счет роста упругой составляющей F вследствие возрастания упругой компоненты деформации (2.16). Однако, с ростом скорости уменьшается модуль сдвига μ , что в итоге приводит к уменьшению упругой составляющей F . Поэтому существует критическая скорость, при превышении которой смазка еще твердоподобна, однако полная сила трения начинает уменьшаться. С дальнейшим повышением скорости при $V > V_{c0}$ (2.24) происходит плавление, и упругие напряжения (2.5) становятся равными нулю, а вместе с ними и первое слагаемое в (2.30), что приводит к резкому снижению полной силы трения. Если после плавления снова увеличивать скорость V , значение F возрастает за счет вязкой компоненты (второе слагаемое в (2.30)). Затвердевает смазка с резким увеличением силы трения F уже при другом значении скорости сдвига $V = V_c^0$ (2.25). Отметим, что в отличие от рис. 2.7а, на рис. 2.7б зависимости силы трения после плавления для всех кривых совпадают, поскольку вязкая компонента F зависит только от скорости сдвига, и не зависит от температуры. Для кривой 4 на рис. 2.7б не показан переход плавления, чтобы не загромождать рисунок. Эта кривая отличается от других на рисунке, поскольку ее сплошной (устойчивое значение F до плавления) и штриховой (неустойчивое зна-

чение F) участки по сравнению с другими кривыми вместе представляют замкнутую линию. При этом после плавления сила трения всегда описывается зависимостью, показанной на рисунке штрихпунктиром (устойчивое значение F после плавления), поскольку смазка уже не может затвердеть при понижении скорости сдвига V .

Отметим, что результаты, представленные на рис. 2.7б, качественно совпадают с картой трения для граничного режима, предложенной в [134] при обобщении экспериментальных данных (см. подраздел 1.1.8 литературного обзора).

2.2.1.4. Кинетика плавления

Динамические характеристики любой трибологической системы определяются ее свойствами в целом. В частности, в области рассмотренного ранее гистерезиса в процессе трения возможна реализация прерывистого (*stick-slip*) режима движения [12, 19, 191]. Типичная схема механического аналога трибологической системы, обладающей упругостью, представлена на рис. 1.21.

Уравнение движения для движущегося блока имеет вид [12, 121, 131]

$$M\ddot{X} = K\Delta X - F, \quad (2.31)$$

где ΔX — растяжение пружины, которое можно определить как

$$\Delta X = \int_0^t V_0 dt' - X, \quad (2.32)$$

где t — время движения свободного конца пружины, а t' — переменная интегрирования. В случае, когда значение V_0 со временем не изменяется, выражение (2.32) приобретает вид

$$\Delta X = V_0 t - X, \quad (2.33)$$

что приводит к уравнению (1.41). Для описания поведения смазки запишем кинетическое релаксационное уравнение типа Ландау — Халатникова [198, 199]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\delta \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} + \xi(t), \quad (2.34)$$

где δ — кинетический коэффициент, характеризующий инерционные свойства системы. В уравнении (2.34) дополнительно введено слагаемое $\xi(t)$, описывающее тепловой шум. В рассматриваемом случае согласно флуктуационно-диссипационной теореме добавку $\xi(t)$ можно представить как аддитивные флуктуации типа белого шума с моментами [21]

$$\langle \xi(t) \rangle = 0; \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\delta k_B T \delta(t - t'), \quad (2.35)$$

где $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К — постоянная Больцмана. В таком виде кинетическое уравнение (2.34) носит название уравнения Ланжевена [200, 201].

Подставляя в (2.34) энергию (2.4), получим уравнение в явном виде:

$$\dot{\varphi} = -\delta (2\alpha (T - T_c) \varphi + a\varphi \varepsilon_{el}^2 - 2b\varphi^3 + 2c\varphi^5) + \xi(t). \quad (2.36)$$

При использовании метода Эйлера для решения уравнения (2.36) соответствующая итерационная процедура приобретает вид

$$\varphi_{i+1} = \varphi_i - \delta (2\alpha (T - T_c) \varphi_i + a\varphi_i \varepsilon_{el}^2 - 2b\varphi_i^3 + 2c\varphi_i^5) \Delta t + \sqrt{\Delta t} W_n. \quad (2.37)$$

Здесь Δt — шаг по времени, и введена случайная величина W_n , определяющаяся функцией Бокса-Мюллера [24, 202]:

$$W_n = \sqrt{2\delta k_B T} \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_i \in (0, 1], \quad (2.38)$$

где r_1, r_2 — псевдослучайные числа с равномерным распределением. Тепловые флуктуации $\xi(t)$ имеют настолько малую интенсивность, что не в состоянии как-либо повлиять на детерминистическое поведение системы, однако их введение необходимо, поскольку при численном решении уравнения (2.36) его корень $\varphi = 0$ является устойчивым, даже когда отвечает максимуму потенциала $\Phi(\varphi)$ (2.4). С введением в рассмотрение естественного теплового шума $\xi(t)$ в такой ситуации система из неустойчивого состояния перейдет в устойчивое, отвечающее минимуму энергии. Таким образом, флуктуации необходимо учитывать из-за особенностей дальнейшего численного счета. Далее в расчетах для упрощения везде полагается $\delta k_B T = 10^{-25}$ м³/с, что при параметрах модели даже меньше, чем естественный тепловой шум.

Для вычисления временной эволюции системы необходимо решать совместно кинетические уравнения (2.31), (2.36), (2.15), определяя натяжение пружины ΔX из (2.32), силу трения F из (2.30), а упругие напряжения σ_{el} согласно (2.5). Также при решении уравнений необходимо учитывать связь $\dot{X} = V$. Ввиду малости времени релаксации деформации τ_ε будем решать совместно два уравнения (2.31), (2.36), определяя текущую деформацию из (2.16).

Результат решения указанных уравнений показан на рис. 2.8. При выбранной

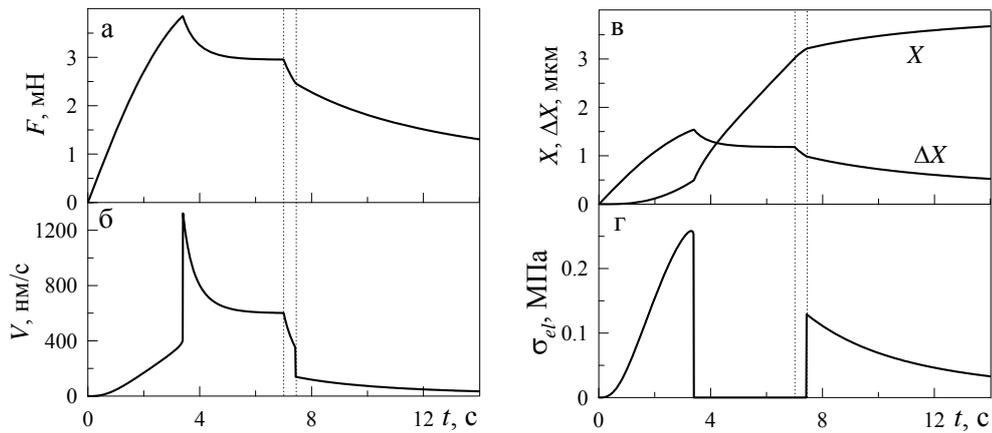


Рис. 2.8. Зависимости силы трения F , скорости блока V , его координаты X , натяжения пружины ΔX и упругих напряжений σ_{el} от времени t при параметрах рис. 2.4, рис. 2.7 и $M = 0,4$ кг, $K = 2500$ Н/м, $\delta = 100$ (Па·с) $^{-1}$, $T = 260$ К. Значение скорости V_0 до первой пунктирной линии ($t < 7$ с) $V_0 = 600$ нм/с, после нее ($t > 7$ с) $V_0 = 0$ нм/с.

температуре в состоянии покоя трущихся поверхностей смазка твердоподобна. В момент времени $t = 0$ правый конец пружины (см. рис. 1.21) начинает движение с постоянной скоростью V_0 . На начальном этапе движения монотонно нарастают обе составляющие силы трения (2.30) за счет увеличения скорости трущегося блока V . Также увеличиваются упругие напряжения σ_{el} и натяжение пружины ΔX . Когда скорость превышает критическое значение $V > V_{c0}$ (2.24), смазка плавится, и упругие напряжения σ_{el} при этом становятся равными нулю. Однако, значение силы трения F при этом скачкообразно не изменяется, поскольку резко возрастает скорость проскальзывания верхнего трущегося блока V , а с ней и вязкая компонента силы трения. Поскольку увеличивается скорость движения блока V , он быстро перемещается на большое расстояние, о чем свидетельствует увеличение угла наклона зависимости $X(t)$ к оси абсцисс после плавления. По-

тому как после плавления блок движется со скоростью V , существенно превышающей скорость пружины V_0 , ее натяжение ΔX уменьшается. До первой пунктирной линии на рисунке значение V_0 сохраняется постоянным, и со временем устанавливается стационарное состояние жидкоподобной смазки, с неизменными значениями силы трения F , скорости блока V , величины растяжения пружины ΔX и нулевыми упругими напряжениями σ_{el} . При этом зависимость $X(t)$ приобретает линейный вид. После первой пунктирной линии скорость V_0 полагается равной нулю, т.е. правый конец пружины останавливается. При этом начинается медленная остановка трущегося блока, поскольку смазка жидкоподобна (момент времени между пунктирными линиями на рисунке). После второй пунктирной линии скорость принимает значение $V < V_c^0$ (2.25), и смазка резко затвердевает. При этом в ней появляются упругие напряжения, за счет чего упругая составляющая силы трения становится не равной нулю, однако это изменение компенсирует резкое уменьшение вязкой составляющей силы F из-за падения скорости движения V . Поэтому сила трения снова не испытывает скачкообразного изменения. После затвердевания смазки наблюдается процесс медленной релаксации параметров, показанных на рисунке. Это происходит из-за того, что при движении верхнего блока теперь уменьшается натяжение пружины ΔX , а с ним и упругая сила $K\Delta X$, обеспечивающая движение. Уравнение (2.31) в стационарном случае преобразуется в условие

$$K\Delta X = F. \quad (2.39)$$

Сила трения (2.30) в предлагаемой модели не имеет статической компоненты, не зависящей от скорости. Поэтому ненулевая F отвечает значению скорости $V \neq 0$, а при таком условии со временем уменьшается натяжение пружины ΔX . Этот факт согласно (2.39) приводит к уменьшению силы трения F , которое при малых скоростях согласно рис. 2.7б возможно только с уменьшением V . Таким образом, величины F , V , ΔX , σ_{el} будут уменьшаться, пока не достигнут нулевых значений. При больших трибологических давлениях в режиме граничного трения сила трения обычно имеет независимую от скорости компоненту [131]. В таком случае происходит релаксация F до значения этой статической компоненты, и при этом

система прекращает движение при $\Delta X \neq 0$ (см. (2.39)). Детальное рассмотрение указанного случая проведено в разделе 3 диссертационной работы. Отметим, что фазовая диаграмма для трибологической системы в координатах $V_0 - T$ не будет совпадать с показанной на рис. 2.6, поскольку даже при скоростях $V_0 < V_{c0}$ в процессе трения за счет наличия пружины в определенные моменты времени возможно значение скорости $V > V_{c0}$, обеспечивающее плавление смазки.

2.2.1.5. Прерывистый режим

В предыдущем подразделе рассмотрен режим, в котором с течением времени устанавливается стационарное движение трущегося блока с постоянной скоростью V . Однако, экспериментальные работы однозначно указывают, что в граничном режиме трения часто реализуется прерывистый (*stick-slip*) режим движения, в котором относительная скорость трущихся поверхностей периодически изменяется со временем [12, 87, 153, 159]. Указанный режим показан на рис. 2.9, который представляет те же зависимости, что и рис. 2.8, только при других параметрах. Согласно рисунку смазка периодически плавится и затвердевает, что и

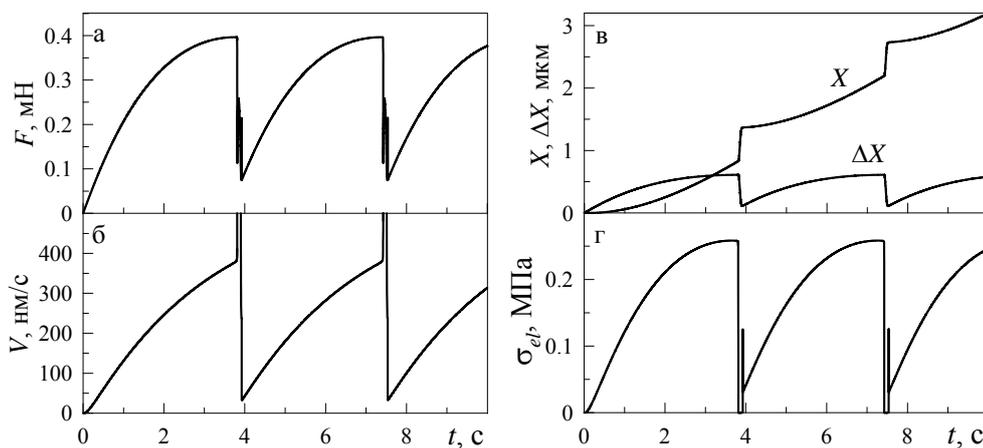


Рис. 2.9. Кинетические зависимости исследуемых величин при параметрах рис. 2.8, за исключением $A = 1,2 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$, $k = 10^4 \text{ Па} \cdot \text{с}^{1/3}$, $K = 650 \text{ Н/м}$, $V_0 = 378 \text{ нм/с}$.

приводит к установлению колебательного характера движения. На рис. 2.10 показаны те же зависимости, но подробно выделена область фазового перехода.

Согласно рисункам вначале движения, как и на рис. 2.8, монотонно возрастает натяжение пружины ΔX , за счет чего увеличивается скорость сдвига верхнего

блока V , а с ее увеличением растут упругие напряжения σ_{el} и сила трения F . Блок при этом перемещается на расстояние X , также увеличивающееся со временем. На рис. 2.10 подробно видно, что при выполнении условия $V > V_{c0}$ (2.24) смаз-

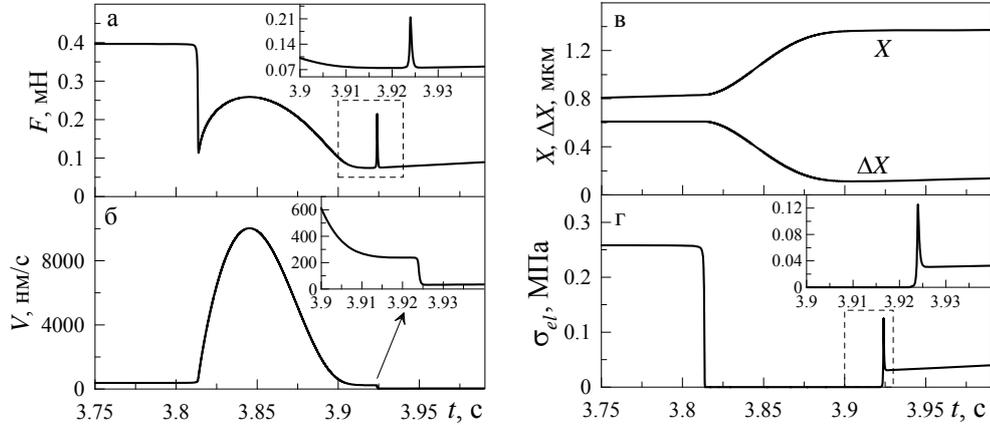


Рис. 2.10. Увеличенные фрагменты зависимостей, показанных на рис. 2.9. На вставках к рисункам показаны увеличенные области, обведенные штриховыми линиями. На зависимости $V(t)$ штриховая линия отсутствует, поскольку при данном масштабе плохо видна.

ка плавится, а напряжения σ_{el} релаксируют до нуля, что приводит к уменьшению полной силы трения и возрастанию скорости сдвига V . Поскольку при этом трущийся блок движется намного быстрее правого конца пружины, натяжение ΔX уменьшается, а вместе с ним и упругая сила $K\Delta X$, за счет которой осуществляется движение. С ростом скорости V в расплавленном состоянии также растет и сила трения. Когда сила трения F и скорость V достигают своих максимальных значений, натяжение пружины становится настолько малым, что величины V и F начинают уменьшаться. Однако, после этого некоторое время сохраняется условие $V > V_0$, поэтому ΔX продолжает уменьшение. За счет этого и наступает момент $V < V_c^0$, в который смазка затвердевает. Затвердеванию отвечает пикообразное увеличение силы трения F (см. вставку на рис. 2.10а), поскольку в смазке появляются упругие напряжения (см. вставку на рис. 2.10г). На вставке на зависимости $V(t)$ видно, что после затвердевания уменьшается скорость V . Происходит такое резкое снижение скорости, поскольку за время проскальзывания натяжение пружины ΔX значительно уменьшается, и упругая сила $K\Delta X$ становится не в состоянии поддерживать движение с большой скоростью. Поскольку теперь смазка твердоподобна, а скорость V мала, пружина снова натягивается, пока не

наступает критическая скорость, при которой смазка плавится. Указанный процесс периодичен во времени. Для выполнения условия затвердевания $V < V_c^0$ после плавления необходимо обеспечение малого значения силы трения в жидкоподобном состоянии смазки, чтобы трущийся блок за время проскальзывания успел переместиться на большое расстояние, и натяжение пружины значительно ослабло. Поэтому в параметрах рис. 2.9 и рис. 2.10 выбраны меньшие значения коэффициента k и площади соприкосновения поверхностей A по сравнению с параметрами рис. 2.8. В экспериментальных работах приводятся зависимости силы трения от времени $F(t)$, подобные показанным на рис. 2.9а, т.е. на них не виден переходной режим, подробно проиллюстрированный на рис. 2.10. Для экспериментального обнаружения такого переходного режима необходимо проводить эксперименты с большей точностью и малым временным интервалом измерения в области перехода.

На рис. 2.11 показаны зависимости силы трения F от времени t при фиксированной температуре смазочного материала T , но с увеличением скорости сдвига V . Согласно зависимости, показанной на рис. 2.11а, при повышении скорости

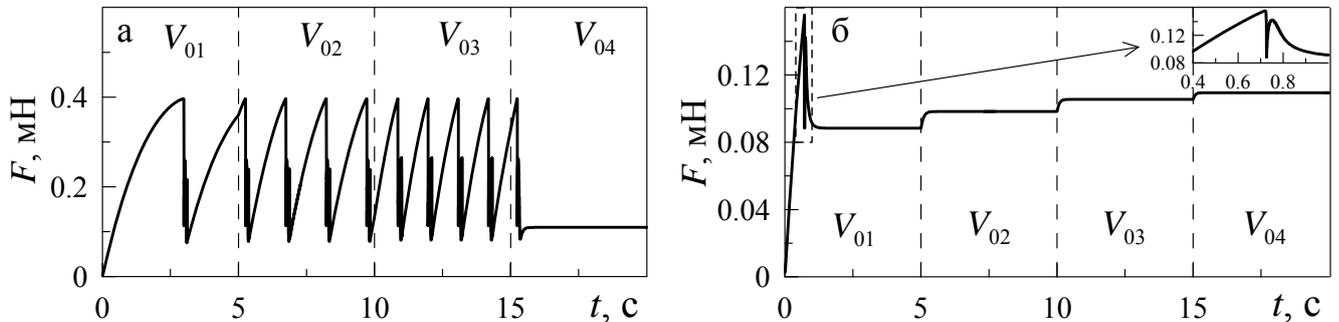


Рис. 2.11. Зависимости силы трения F (2.30) от времени t при параметрах рис. 2.9 и скоростях $V_{01-04} = 400, 550, 680, 760$ нм/с: (а) $T = 260$ К; (б) $T = 295$ К.

сти частота *stick-slip* пиков (фазовых переходов между кинетическими режимами трения) увеличивается. Это происходит за счет того, что при высоких скоростях движения гораздо быстрее устанавливается критическое значение упругих напряжений, при которых происходит плавление смазочного материала. Соответственно, плавление наступает раньше, и за один и тот же промежуток времени система успевает совершить большее количество фазовых переходов плавления.

ние/затвердевание. Рис. 2.11б построен при большей температуре T смазочного материала. Здесь для всех выбранных скоростей смазка жидкоподобна, однако имеет твердоподобную структуру в состоянии покоя, поэтому вначале движения при $V_0 = V_{01}$ на зависимости наблюдается пик, подробно показанный на вставке. Эта увеличенная часть зависимости аналогична показанной на рис. 2.10а, с тем отличием, что отсутствует пик, соответствующий затвердеванию смазки, поскольку в рассматриваемом случае после плавления смазка остается жидкоподобной [203].

Рис. 2.12 показывает зависимости силы трения F от времени при последовательном возрастании температуры смазочного материала T . Зависимость, приве-

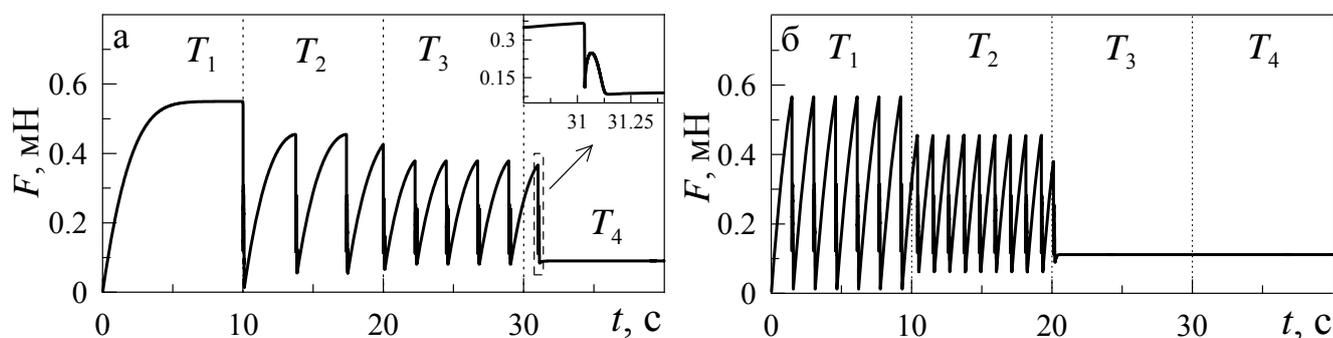


Рис. 2.12. Зависимости силы трения F (2.30) от времени t при параметрах рис. 2.9 и температурах $T_{1-4} = 230, 250, 263, 265$ К: (а) $V_0 = 420$ нм/с; (б) $V_0 = 800$ нм/с.

денная на 2.12а, построена при скорости V_0 , при которой температура $T = T_1$ соответствует твердоподобной структуре смазки, т.е. при этом значении T в процессе движения смазка не плавится, и прерывистое трение не реализуется. С дальнейшим повышением температуры устанавливается прерывистый *stick-slip* режим, причем рост T приводит к снижению амплитуды колебаний силы трения, а также к увеличению частоты фазовых переходов. Рис. 2.12б построен при большем значении скорости V_0 . Здесь при температурах $T = T_3$ и $T = T_4$ смазка жидкоподобна, поэтому наступает режим скольжения, характеризующийся постоянными значениями кинетической силы трения F и относительной скорости сдвига трущихся поверхностей V . Поскольку в рамках рассматриваемой в этом разделе диссертации модели температура T после плавления не оказывает влияния на силу трения (2.30), при этих температурах F имеет одинаковое значение.

Эксперименты с подобным исследованием влияния температуры нам неизвестны, поэтому зависимости, приведенные на рис. 2.12, являются прогнозирующими. Таким образом, разработанный в диссертации подход может использоваться не только для описания известных экспериментов, но и для предсказания новых эффектов, которые пока экспериментально не наблюдались.

2.2.2. Описание периодического внешнего воздействия

В подразделе 2.2.1 диссертации описана модель фазового перехода первого рода между структурными состояниями смазочного материала в режиме граничного трения. На основе модели рассмотрено поведение механического аналога трибологической системы, который ранее исследовался многими авторами [12, 121, 131]. Данная трибологическая модель позволила описать особенности прерывистого режима и причины его возникновения. Однако, такой подход имеет определенные недостатки. Поскольку в рассмотренном случае трущиеся поверхности все время сдвигаются в одну сторону, экспериментально такую ситуацию можно рассмотреть только на малых временах. Это связано прежде всего с тем, что получаемые атомарно-гладкие поверхности как правило имеют довольно малый размер. Например, в работе [12] рассматриваются поверхности с областью контакта $A = 3 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$. Поэтому само устройство SFA предполагает изучение процессов граничного трения при периодическом колебательном движении поверхностей трения во взаимно обратных направлениях. С практической точки зрения такие колебательные фрикционные системы также имеют повышенное значение и изучаются во многих работах [90, 204–206].

2.2.2.1. Трибологическая система

Рассмотрим трибологическую систему, показанную на рис. 2.13. Здесь две пружины с коэффициентом жесткости K каждая связаны с блоком массы M , находящимся на роликах, трением качения которых в дальнейшем рассмотре-

нии пренебрегаем. На указанном блоке находится второй блок, приводящийся в движение за счет внешних сил. При наличии сил взаимодействия между

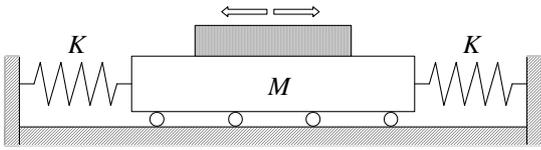


Рис. 2.13. Схема трибологической системы.

тремя поверхностями двух блоков при движении верхнего сдвигается и нижний, причем его траектория принципиально зависит от режима трения. Подобная установка экспериментально исследована в работах [204–206].

В [205] как трущиеся поверхности используется стальная пара трения, а в качестве смазки выступает парафиновое масло ISO 32, непрерывно подающееся в зону контакта с фиксированной объемной скоростью.

Пусть X , $V = \dot{X}$ – координата и скорость верхнего трущегося блока, x , $v = \dot{x}$ – координата и скорость нижнего. Далее рассматривается случай, в котором верхний блок приводится в движение согласно циклическому закону

$$X = X_m \cos(\omega t), \quad (2.40)$$

$$V = -X_m \omega \sin(\omega t), \quad (2.41)$$

где X_m – амплитуда, ω – циклическая частота. Уравнение движения нижнего блока записывается в виде [205]

$$M\ddot{x} + 2Kx - F = 0, \quad (2.42)$$

где F – сила трения, благодаря которой осуществляется движение нижнего блока. В рассматриваемом случае с учетом направления движения сила трения между контактирующими поверхностями определяется формулой (ср. с (2.30))

$$F = \left[\sigma_{el} + k \cdot \operatorname{sgn}(V - v) \left(\frac{|V - v|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (2.43)$$

где для учета направления действия силы в формуле (2.43) используется знаковая функция (1.44). Эволюционное уравнение для упругих деформаций (2.15) в рассматриваемом случае будет иметь вид

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{el} = -\varepsilon_{el} + \frac{(V - v) \tau_\varepsilon}{h}. \quad (2.44)$$

2.2.2.2. Кинетика плавления

Для вычисления временной эволюции системы необходимо решать совместно кинетические уравнения (2.42), (2.36), (2.44), определяя силу трения F из (2.43), (1.44), а упругие напряжения σ_{el} согласно (2.5). Также при решении уравнений необходимо учитывать связь $\dot{x} = v$ и (2.40), (2.41). Ввиду малости времени релаксации упругой деформации τ_ε будем решать совместно два уравнения (2.42), (2.36), а текущую деформацию определять согласно соотношению

$$\varepsilon_{el} = \frac{(V - v)\tau_\varepsilon}{h}, \quad (2.45)$$

которое следует из (2.44) при использовании адиабатического приближения $\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{el} \approx 0$ [207]. Далее при численном анализе выбирается шаг интегрирования по времени $\Delta t = 10^{-10}$ с.

Результат решения указанных уравнений показан на рис. 2.14. На рис. 2.14а

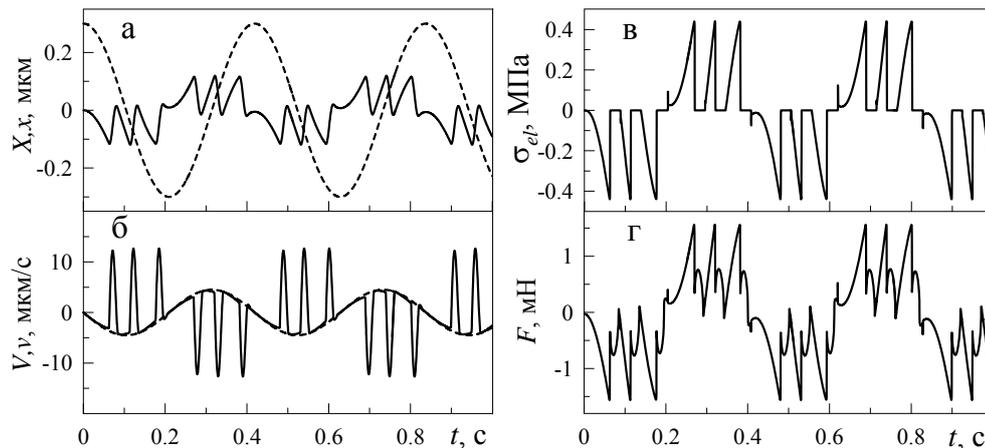


Рис. 2.14. Зависимости координат X, x , скоростей V, v , упругих напряжений σ_{el} (2.5) и силы трения F (2.43) от времени t при параметрах рис. 2.4 и $\gamma = -2/3$, $A = 3 \cdot 10^{-9}$ м², $k = 10^4$ Па·с^{1/3}, $\delta = 100$ (Па·с)⁻¹, $T = 220$ К, $X_m = 0,3 \cdot 10^{-6}$ м, $\omega = 15$ рад/с, $M = 0,4$ кг, $K = 7000$ Н/м. Штриховыми линиями показаны $X(t)$, $V(t)$, сплошными — $x(t)$, $v(t)$.

штриховой линией показана зависимость координаты верхнего трущегося блока $X(t)$ (2.40), а сплошной — координата нижнего блока $x(t)$, которая имеет более сложную временную зависимость. Также на рисунке представлены зависимости скоростей трущихся блоков V и v от времени t , возникающие в смазке упругие сдвиговые напряжения σ_{el} (2.5) и полная сила трения F (2.43). В момент времени $t = 0$ трущиеся блоки покоятся, и смазка твердоподобна, поскольку

ку ее температура $T < T_c$, а в состоянии покоя $\varepsilon_{el} = 0$. При $t > 0$ верхний трущийся блок начинает движение, и его скорость при этом увеличивается согласно (2.41). Поскольку смазка твердоподобна, сила трения F имеет вязкую и упругую составляющую, и нижний блок увлекается вслед за верхним, однако при его движении увеличивается абсолютное значение упругой силы $2Kx$, которая препятствует движению нижнего блока, и поэтому его скорость v растет не так стремительно, как V . При этом увеличивается относительная скорость сдвига трущихся поверхностей $(V - v)$, и наступает момент, когда выполняется условие $(V - v) > V_{c0}$ (2.24), и смазка плавится. При этом сила трения F существенно уменьшается, поскольку напряжения σ_{el} становятся нулевыми, и нижний блок проскальзывает на значительное расстояние за счет упругой силы, создаваемой сжатой и растянутой пружиной. За счет этого относительная скорость сдвига $(V - v)$ снова уменьшается, и при выполнении условия $(V - v) < V_c^0$ (2.25) смазка вновь затвердевает. Как это следует из рисунка, описанный процесс периодичен во времени.

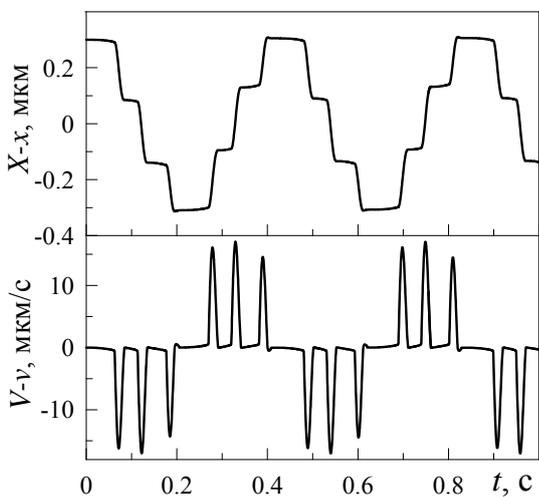


Рис. 2.15. Зависимости относительно-го перемещения $X(t) - x(t)$ и относительной скорости $V(t) - v(t)$ трущихся блоков от времени t , соответствующие рис. 2.14.

На рис. 2.15 дополнительно приведены временные зависимости относительного перемещения блоков и их относительной скорости. Здесь в моменты времени, когда осуществляется ”прилипание“ поверхностей, относительное перемещение $(X - x)$ остается постоянным, а относительная скорость сдвига $(V - v)$ близка к нулевому значению (при этом на рис. 2.14 зависимости $V(t)$ и $v(t)$ визуально совпадают). Таким образом, реализуется периодический прерывистый режим движения (*stick-slip*), который также характерен для сухого трения без смазки [11]. При выбранных

параметрах за один полный период блоки 6 раз ”прилипают“ друг к другу — по 3 раза при движении в каждом из направлений, причем полученные зависимости

симметричны относительно направления движения. Однако, в зависимости от параметров системы возможна реализация совершенно различных ситуаций.

Фазовые портреты системы при параметрах рис. 2.14 и различных значениях циклической частоты ω представлены на рис. 2.16. Из рисунка легко видеть, что

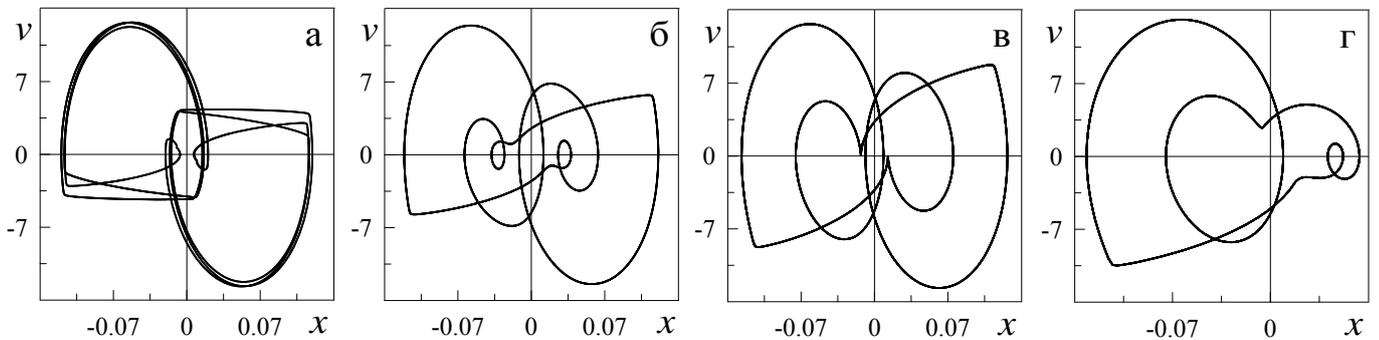


Рис. 2.16. Фазовые портреты системы на плоскости $\dot{x}(x)$, соответствующие параметрам рис. 2.14 и частотам ω , рад/с: а – 15, б – 25, в – 38, г – 44.

с ростом частоты поведение системы упрощается, поскольку уменьшается общее количество гармоник. Отметим тот факт, что все фазовые портреты симметричны относительно начала координат, кроме показанного на рис. 2.16г, который демонстрирует ситуацию, когда движение верхней поверхности трения в обоих направлениях не одинаково влияет на перемещение нижней. Такой случай отвечает реализации в системе эффектов памяти, наблюдаемых экспериментально [12]. Поскольку эта ситуация существенно отличается от других, для нее на рис. 2.17 дополнительно приведены временные зависимости рассматриваемых величин.

Согласно этому рисунку движение нижнего трущегося блока также является периодичным во времени, однако моменты ”прилипания“ поверхностей наступают при движении верхнего блока только в одном из направлений при положительных X и $V < 0$. При значении частоты $\omega = 170$ рад/с согласно (2.41) в системе реализуется значение скорости сдвига, при которой смазка всегда жидкоподобна, поэтому соответствующий фазовый портрет показывает периодическое движение по закону, подобному (2.40) [48]. Отметим, что фазовый портрет на рис. 2.16а построен при значении частоты $\omega = 15$ рад/с, что соответствует временным зависимостям, приведенным на рис. 2.14.

Рис. 2.18 построен при возрастании температуры смазки T . Здесь зависи-

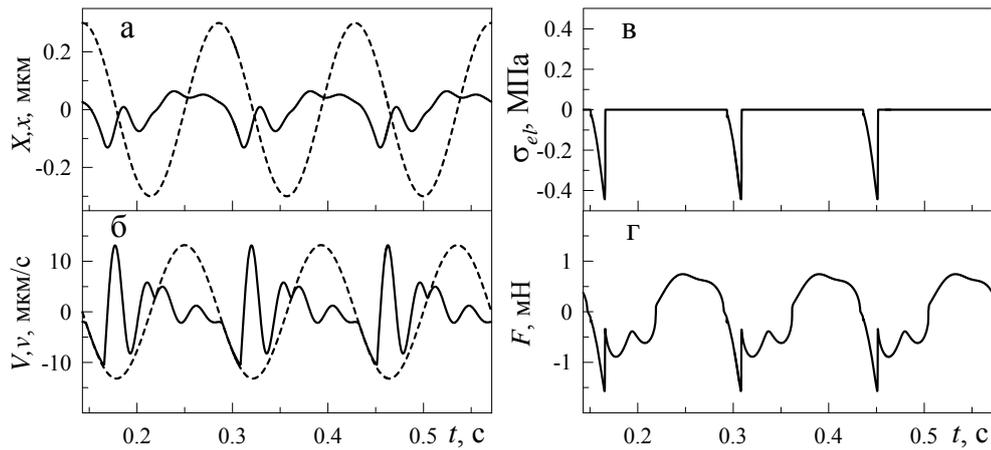


Рис. 2.17. Временные зависимости основных величин, соответствующие параметрам рис. 2.16г.

ности по оси времени разделены на 4 участка, причем для каждого последующего температура выбирается большей, чем для предыдущего. Зависимость на первом участке ($T = T_1$) повторяет зависимость, более подробно показанную на рис. 2.14, поскольку получена при той же температуре смазки. С дальнейшим повышением температуры ($T = T_2$), как и при $T = T_1$, реализуется прерывистый (*stick-slip*) режим движения, однако уменьшается количество пиков прилипания, и они становятся ниже, т.е. сила трения в твердopodobном состоянии смазки с повышением температуры уменьшается, и смазка большее за период количество времени находится в жидкоподобном состоянии. С еще бóльшим повышением температуры ($T = T_3$) амплитуда упругих напряжений σ_{el} и силы трения F становится еще меньше. При $T = T_4$ смазка жидкоподобна и упругие напряжения равны нулю. Эксперименты с подобным исследованием влияния температуры смазочного материала на режимы граничного трения нам неизвестны, поэтому зависимости, приведенные на рис. 2.18, являются прогнозирующими.

2.3. Фазовый переход первого рода (несимметричный потенциал)

В подразделе 2.2 рассмотрена модель фазового перехода первого рода при симметричном разложении свободной энергии ряд по степеням параметра порядка при учете только четных степеней разложения. Однако, поскольку точный вид разложения свободной энергии нам неизвестен, мы должны рассмотреть раз-

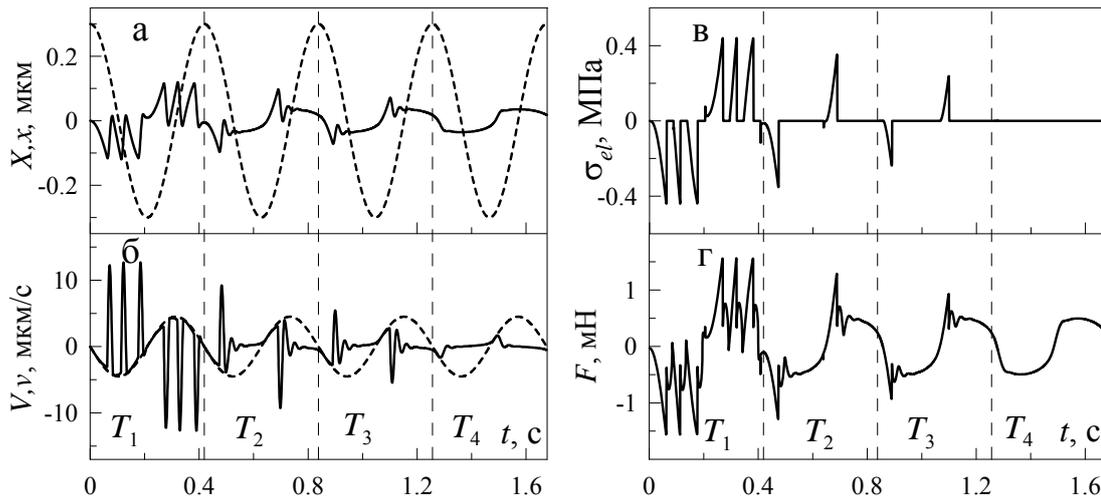


Рис. 2.18. Зависимости координат X, x , скоростей V, v , упругих напряжений σ_{el} (2.5) и силы трения F (2.43) от времени t при параметрах рис. 2.14 и температурах $T_{1-4} = 220, 240, 265, 280$ К. Штриховыми линиями показаны $X(t), V(t)$, сплошными — $x(t), v(t)$.

личные варианты разложений, поскольку свойства ультратонких слоев веществ, зажатых между атомарно-гладкими твердыми поверхностями, критическим образом отличаются от свойств объемных смазок, состоящих из тех же компонентов. Поэтому в каждой конкретной ситуации разложение может отличаться. В данном подразделе рассмотрена модель фазового перехода первого рода, основанная на несимметричном разложении параметра порядка с учетом инварианта третьей степени. Такая форма потенциала используется для описания переходов твердое тело—жидкость [186] и является более естественной с физической точки зрения, в то время как симметричное разложение используется в том случае, если нечетные степени параметра порядка запрещены из симметричных принципов.

2.3.1. Основные уравнения и прерывистый режим при сдвиге поверхностей в одну сторону

2.3.1.1. Свободная энергия, стационарные состояния и фазовая диаграмма

Рассмотрим разложение свободной энергии в виде (ср. с (2.4))

$$\Phi = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4 + \frac{g}{2}(\nabla\varphi)^2. \quad (2.46)$$

Будем рассматривать однородный случай, в котором $g = 0$. При этом упругие напряжения определяются формулой (2.5). Условие стационарности $\partial\Phi/\partial\varphi = 0$ в рассматриваемой ситуации примет вид квадратного уравнения (ср. с (2.7))

$$\varphi^2 - \frac{b}{c}\varphi + \left[\frac{2\alpha(T - T_c)}{c} + \frac{a}{c}\varepsilon_{el}^2 \right] = 0, \quad (2.47)$$

решение которого задает стационарные значения параметра порядка (ср. с (2.8))

$$\varphi_{\mp} = \frac{b}{2c} \mp \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{2\alpha(T - T_c)}{c}\right)}, \quad (2.48)$$

где φ_+ , как и ранее, отвечает устойчивым стационарным состояниям системы.

Уравнение (2.48) в случае максимального значения безразмерного параметра порядка $\varphi_{\max} = 1$ при $V = 0$ и $T = 0$ приводит к условию (ср. с (2.9))

$$c - b - 2\alpha T_c = 0. \quad (2.49)$$

В рассматриваемой ситуации критическая температура T_c^0 и скорость V_c^0 , при которых происходит затвердевание смазочного материала, совпадают со значениями (2.21) и (2.25), а соответствующие величины, при которых смазка плавится, даются выражениями (ср. с (2.18) и (2.24))

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h} \right)^2 + \frac{b^2}{8\alpha c}, \quad (2.50)$$

$$V_{c0} = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{4ac}}. \quad (2.51)$$

При этом гистерезис по температуре задается выражением (ср. с (2.23))

$$\Delta T = T_{c0} - T_c^0 = \frac{b^2}{8\alpha c}. \quad (2.52)$$

Причем при плавлении стационарное значение параметра порядка скачкообразно изменяется от

$$\varphi_A = \frac{b}{2c} \quad (2.53)$$

до нуля, а при затвердевании — от нуля до значения⁷

$$\varphi_B = \frac{b}{c}. \quad (2.54)$$

⁷Процедура аналитического вывода величин T_{c0} , T_c^0 , V_{c0} , V_c^0 , ΔT , φ_A и φ_B абсолютно аналогична описанной в подразделе 2.2.1 диссертационной работы, при использовании выражения (2.48) вместо (2.8).

В случае симметричного разложения, разобранный в подразделе 2.3.1 диссертации, таким образом себя вел квадрат параметра порядка. На рис. 2.19

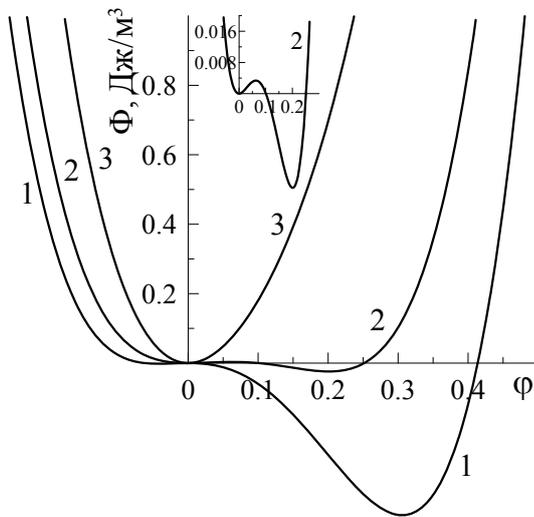


Рис. 2.19. Потенциал $\Phi(\varphi)$ (2.46). Кривые 1–3 соответствуют температурам $T = 270, 280, 310$ К и скорости сдвига $V = 300$ нм/с.

приведены зависимости потенциала (2.46) от параметра порядка φ при фиксированных параметрах модели $\alpha = 0,6$ Дж·К⁻¹/м³, $T_c = 290$ К, $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па, $b = 125$ Дж/м³, $c = 473$ Дж/м³, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$ с для трех значений температуры T . При значении $T < T_c^0$ (2.21) в области $\varphi > 0$ реализуется единственный ненулевой минимум потенциала (кривая 1 на рис. 2.19). В этой ситуации смазка твердоподобна, поскольку согласно (2.6) модуль сдвига $\mu > 0$. В промежуточном интервале температур $T_c^0 < T < T_{c0}$ нулевой максимум потенциала трансформируется

в минимум, и дополнительно появляется максимум, разделяющий нулевой и ненулевой минимумы (кривая 2 на рис. 2.19, более подробно показана на вставке к рисунку). В такой ситуации смазка может быть как твердоподобной, так и жидкоподобной, в зависимости от начальных условий. И в случае $T > T_{c0}$ реализуется единственный нулевой минимум потенциала $\Phi(\varphi)$ (кривая 3 на рис. 2.19), который соответствует нулевому значению модуля сдвига $\mu = 0$ и жидкоподобной структуре смазочного материала. В рассматриваемом случае нефизичные отрицательные значения параметра порядка $\varphi < 0$ следует исключать из рассмотрения, хотя, к примеру, кривая 1 на рис. 2.19 показывает устойчивое стационарное значение при $\varphi < 0$. При рассмотрении кинетики следует исключать такие ситуации с отрицательным параметром порядка, в то время как в подразделе 2.3.1 в случае симметричного потенциала такой необходимости не возникало, в связи с математической эквивалентностью отрицательных и положительных значений параметра порядка.

На рис. 2.20 приведены зависимости стационарных значений параметра по-

рядка φ_0 от температуры смазочного материала T и скорости сдвига V , которые определяются формулой (2.48). Здесь переходы плавления и затвердевания по-

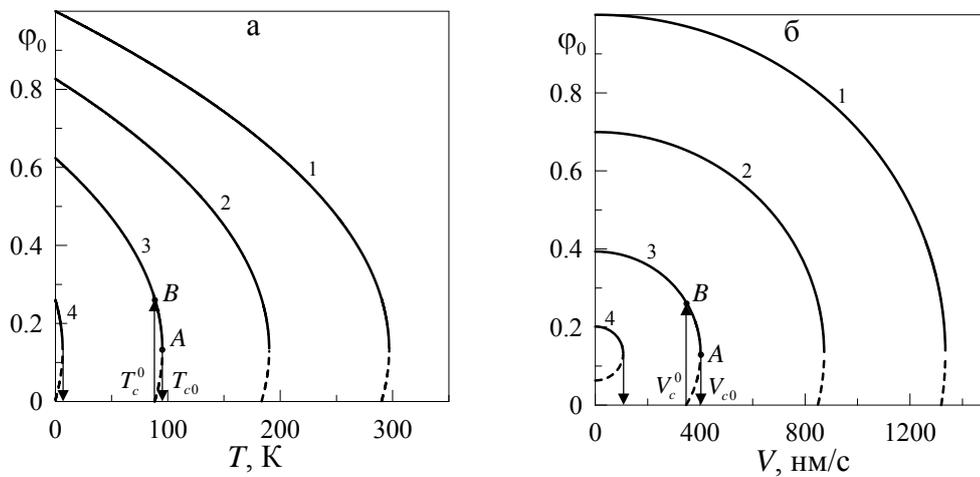


Рис. 2.20. Зависимости стационарного значения параметра порядка φ_0 (2.48) от температуры смазки T и скорости сдвига V при параметрах рис. 2.19: (а) кривые 1–4 соответствуют скоростям сдвига $V = 0, 800, 1100, 1320$ нм/с; (б) кривые 1–4 соответствуют температурам $T = 0, 170, 270, 295$ К.

казаны только для кривых под номером 3, чтобы не загромождать рисунок, для остальных кривых наблюдается аналогичное поведение. Подробного описания рисунка мы здесь не приводим, поскольку оно совпадает с описанием обсуждаемого ранее рис. 2.4. Однако, имеется несколько существенных отличий. Во-первых, показанные на рисунке критические температуры T_{c0} и скорости V_{c0} , при которых происходит плавление смазочного материала, как это указано выше, даются формулами (2.50) и (2.51), которые отличаются от приведенных в подразделе 2.2.1.2 выражений (2.18) и (2.24). Второе существенное отличие содержится в том, что на рис. 2.4 показано поведение квадрата параметра порядка φ_0^2 , который согласно формуле (2.6) задает модуль сдвига, в то время как рис. 2.20 показывает зависимости для параметра порядка φ_0 в первой степени. Поскольку в обоих случаях наблюдаемой величиной является модуль сдвига μ , пропорциональный квадрату параметра порядка φ^2 , и именно он через упругие напряжения (2.5) и силу трения F (2.30) (либо (2.43)) входит в уравнение движения (2.31) (либо (2.42)), следует ожидать различное поведение системы в этих двух случаях (симметричный потенциал (2.4), либо несимметричный (2.46)).

На рис. 2.21 показана фазовая диаграмма системы, рассчитанная при параметрах рис. 2.20, которая качественно повторяет фазовую диаграмму, приведенную ранее на рис. 2.6, только с тем отличием, что

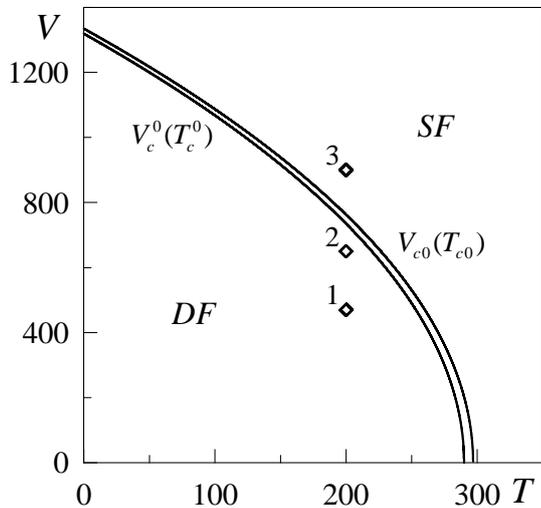


Рис. 2.21. Фазовая диаграмма с областями жидкостного (SF) и сухого (DF) трения при параметрах рис. 2.20.

показанные на рисунке величины T_{c0} и V_{c0} задаются формулами (2.50) и (2.51). Как и ранее, фазовая диаграмма соответствует случаю сдвига трущихся поверхностей с постоянной скоростью V , когда движущая пружина, показанная на рис. 1.21, заменяется жестким соединением. Однако, любая трибологическая система обладает конечной жесткостью, которой нельзя пренебрегать при описании результатов реальных экспериментов. Эту жесткость и моделирует показанная на рис. 1.21 пружина.

2.3.1.2. Сила трения и кинетика плавления

Зависимости силы трения F (2.30) от температуры T и скорости сдвига V , соответствующие параметрам рис. 2.19 и рис. 2.20, показаны на рис. 2.22. При сравнении результатов, показанных на рис. 2.22 с полученными ранее и приведенными на рис. 2.7 видны определенные количественные отличия, хотя качественно поведение совпадает. Это связано с тем, что хотя потенциалы (2.4) и (2.46) и имеют различный вид, они оба описывают фазовый переход первого рода, что и демонстрируют рис. 2.7 и рис. 2.22. На экспериментально полученных зависимостях силы трения от скорости, показанных на рис. 1.13б, видно, что в зависимости от параметров системы возможны различные сценарии поведения, поэтому к результатам на рис. 2.7 и рис. 2.22 следует относиться, как к показывающим поведение различных трибологических систем.

Для того, чтобы показать, что фазовые диаграммы, приведенные на рис. 2.6 и рис. 2.21 справедливы только при сдвиге с постоянной скоростью, проведем

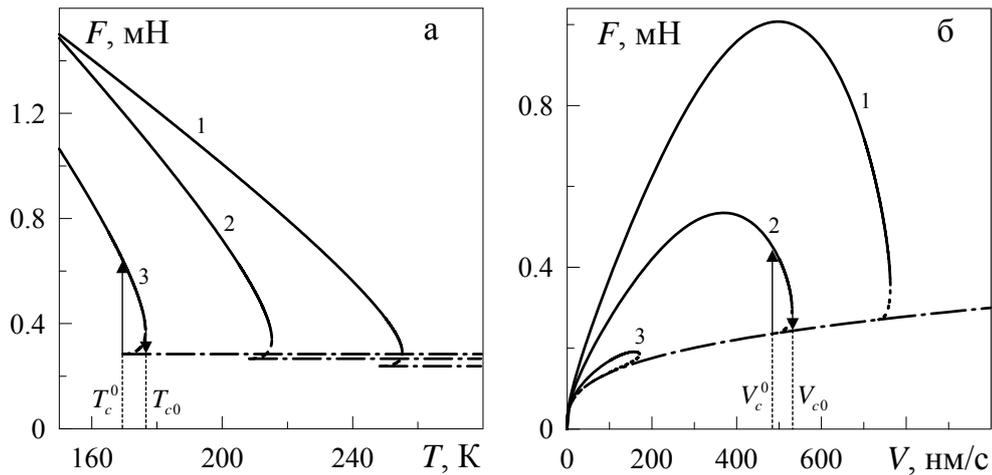


Рис. 2.22. Зависимости силы трения F (2.30) от температуры поверхностей трения T и скорости сдвига V при параметрах рис. 2.20 и $\gamma = -2/3$, $A = 3 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$, $k = 10^4 \text{ Па} \cdot \text{с}^{1/3}$: а – кривые 1–3 отвечают скоростям $V = 500, 700, 850 \text{ нм/с}$; б – кривые 1–3 отвечают температурам $T = 200, 250, 292 \text{ К}$.

моделирование кинетики системы, используя процедуру, подробно описанную в подразделе 2.2.1.4. Единственное отличие здесь в том, что кинетическое уравнение для параметра порядка (2.36) и итерационная процедура (2.37) в рассматриваемом случае приобретают вид

$$\dot{\varphi} = -\delta (2\alpha (T - T_c) \varphi + a\varphi\varepsilon_{el}^2 - b\varphi^2 + c\varphi^3) + \xi(t), \quad (2.55)$$

$$\varphi_{i+1} = \varphi_i - \delta (2\alpha (T - T_c) \varphi_i + a\varphi_i\varepsilon_{el}^2 - b\varphi_i^2 + c\varphi_i^3) \Delta t + \sqrt{\Delta t}W_n. \quad (2.56)$$

В работе [41] при реализации численной процедуры (2.56) получены зависимости от времени силы трения F , относительной скорости сдвига поверхностей V , координаты верхнего трущегося блока X , натяжения пружины ΔX , а также упругих напряжений σ_{el} в различных кинетических режимах. Качественно полученные зависимости повторяют поведение, показанное на рис. 2.9, рис. 2.10, рис. 2.11 и рис. 2.12, поэтому не будем здесь приводить полученные в работе [41] результаты в полном объеме. Также в [41] проведено моделирование поведения шероховатых поверхностей, однако этому вопросу посвящен раздел 4 диссертационной работы. Здесь же мы ограничимся описанием зависимостей силы трения от времени $F(t)$, которые получены при параметрах, соответствующих точкам на фазовой диаграмме на рис. 2.21.

На рис. 2.23 показаны зависимости $F(t)$ (2.30), соответствующие точкам на

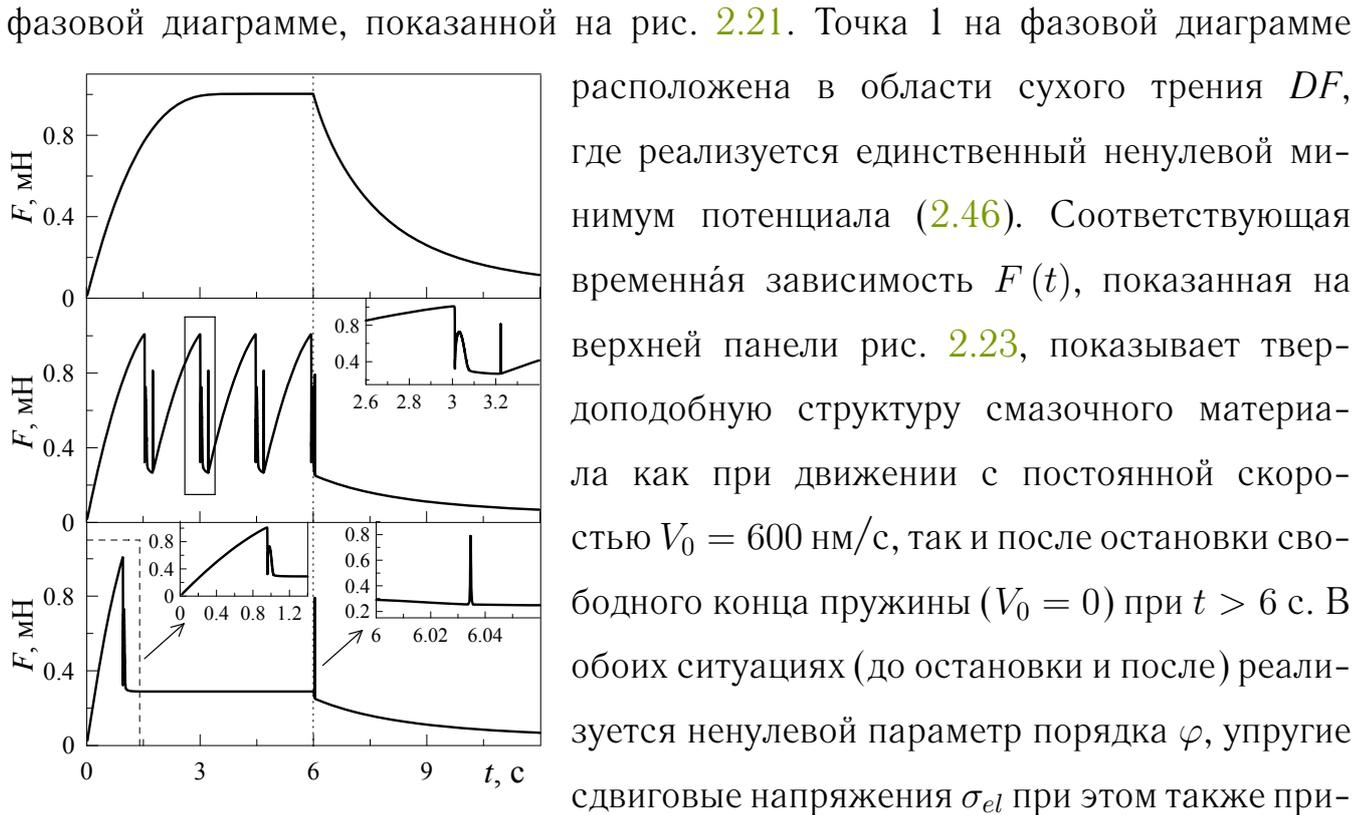


Рис. 2.23. Зависимости силы трения F (2.30) от времени t при параметрах рис. 2.22 и $M = 0,4$ кг, $K = 1500$ Н/м, $\delta = 100$ (Па·с) $^{-1}$, $T = 200$ К. Верхняя панель соответствует точке 1 на диаграмме на рис. 2.21 ($V_0 = 470$ нм/с), средняя — точке 2 ($V_0 = 650$ нм/с), нижняя — точке 3 ($V_0 = 900$ нм/с).

Средняя панель на рис. 2.23 соответствует точке 2 на фазовой диаграмме на рис. 2.21, также находящейся в области сухого трения DF , однако зависимость $F(t)$ демонстрирует прерывистый режим движения, когда смазочный материал периодически плавится и затвердевает. Это связано с наличием пружины в системе, показанной на рис. 1.21. После остановки свободного конца пружины ($V_0 = 0$ при $t > 6$ с) происходит медленная остановка верхнего трущегося блока, которая сопровождается релаксацией величин V , ΔX , σ_{el} к нулевым значениям.

И нижняя панель на рис. 2.23 показывает рассчитанную кинетическую зави-

симось силы трения $F(t)$, которая соответствует параметрам точки 3 на фазовой диаграмме, приведенной на рис. 2.21, находящейся в области сухого трения SF ($V_0 = 900$ нм/с). В этой области в физической положительной области параметра порядка φ реализуется единственный нулевой минимум потенциала $\Phi(\varphi)$ (2.46). Здесь, как это видно на зависимости $F(t)$, в начале движения наблюдается монотонный рост силы трения F , а когда скорость сдвига V превышает критическое значение V_{c0} , происходит плавление смазочного материала, после чего устанавливается движение с постоянной скоростью $V = 900$ нм/с, соответствующей скорости движения свободного конца пружины V_0 . При этом в смазочном слое устанавливаются нулевые упругие напряжения $\sigma_{el} = 0$ [41]. Такое поведение часто наблюдается в экспериментах и связано с тем, что после плавления скорость сдвига всегда превышает критическое значение, необходимое для поддержания смазочного материала в расплавленном состоянии. После остановки ($V_0 = 0$) скорость V начинает уменьшение, и когда она становится меньше значения V_c^0 , которое необходимо для поддержания смазочного материала в жидкоподобном состоянии, он затвердевает. При этом на зависимостях $F(t)$ и $\sigma_{el}(t)$ наблюдается резкий пик, после чего механические параметры системы медленно релаксируют к нулевым значениям. Во всех трех рассмотренных случаях после остановки системы смазка затвердевает, поскольку согласно фазовой диаграмме на рис. 2.21 при $V \approx 0$ и температуре $T = 200$ К смазочный материал твердоподобен и имеет кристаллическую структуру.

2.3.1.3. Прерывистый режим при непрерывном увеличении скорости

Исследуем поведение системы при непрерывном увеличении скорости внешнего привода V_0 с фиксированным ускорением a_{ac} . На рис. 2.24а сплошной линией изображена зависимость скорости верхнего блока V от времени при температуре смазочного материала $T = 200$ К. Штриховой линией на рисунке показана временная зависимость скорости внешнего привода $V_0(t) = a_{ac}t$. Из рисунка следует, что с увеличением скорости V_0 уве-

личивается относительная скорость движения трущихся поверхностей V , но медленнее, поскольку с увеличением V возрастает сила трения F , и пружина растягивается (увеличивается натяжение ΔX). Сначала смазка находится

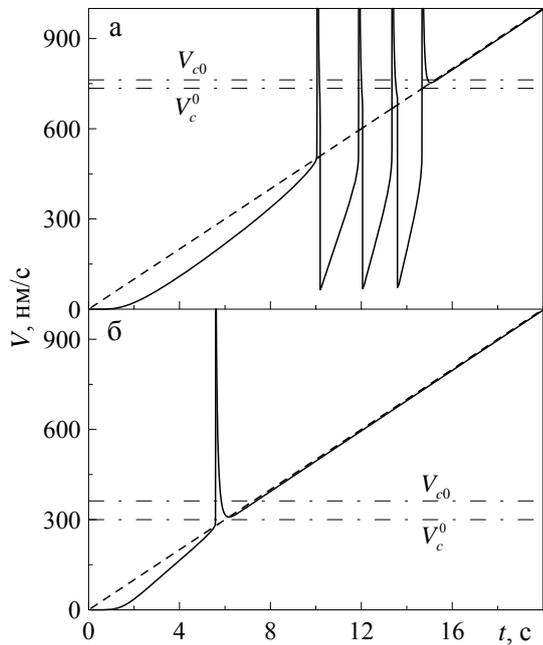


Рис. 2.24. Скорость $V(t)$ при параметрах рис. 2.23 и $a_{ac} = 50$ нм/с²: (а) $T = 200$ К; (б) $T = 275$ К. Сплошной линией изображена скорость V , штриховой — скорость V_0 .

в твердоподобном состоянии, но при достижении блоком скорости V_{c0} (2.51) происходит ее плавление, однако скорость сдвига V начинает стремительно увеличиваться до момента плавления, за счет натяжения пружины и уменьшения упругой компоненты силы трения. С возрастанием скорости до величины $V > V_0$ натяжение пружины ΔX уменьшается, за счет чего со временем скорость V становится меньше значения V_c^0 , а смазочный материал затвердевает. При выбранных параметрах модели такой процесс повторяется во времени, но поскольку растет скорость V_0 , увеличивается частота фазовых переходов плавление/затвердевание [12]. Заметим, что в таком режиме при дальнейшем увеличении скорости внешнего привода V_0 прерывистый режим движения переходит в кинетический режим скольжения со стационарной скоростью $V \approx V_0$, что следует из рисунка. Таким образом, рис. 2.24а с ростом скорости показывает последовательные переходы между режимами сухого (DF), прерывистого (SS), и жидкостного (SF) трения, что подтверждает вид фазовой диаграммы, показанной на рис. 2.21.

Критическим образом на поведение трибологической системы, показанной на рис. 1.21, влияет изменение температуры смазочного материала T . Рис. 2.24б построен при большем значении температуры $T = 275$ К. При такой температуре, поскольку она меньше критического значения T_c^0 (2.21), в состоянии покоя смазочный материал, как и на рис. 2.24а, имеет твердоподобную структуру, и реализуется соответствующий режим сухого трения. При этом обстоятельстве

поведение системы при параметрах рис. 2.24б на начальном этапе (до акта плавления) качественно совпадает с поведением, которое демонстрирует рис. 2.24а. Однако, при выбранной температуре $T = 275$ К после плавления скорость верхнего трущегося блока V после ее резкого увеличения и последующей релаксации в процессе дальнейшего движения больше не становится меньше значения V_c^0 , а выполнение такого условия необходимо для затвердевания смазочного материала. Благодаря этому смазка остается жидкоподобной, а в системе устанавливается стационарный режим жидкостного трения. Поскольку скорость V_0 после плавления продолжает монотонно увеличиваться, и в системе реализуется кинетическая сила трения F (2.30), растущая со скоростью сдвига V , дальше во время движения выполняется условие $V < V_0$.

2.3.2. Описание периодического внешнего воздействия (численный эксперимент)

В работе [38] проведено исследование, аналогичное представленному в подразделе 2.2.2, при использовании потенциала (2.46). Результаты работы [38] качественно совпадают с представленными в подразделе 2.2.2, существенные отличия наблюдаются только на фазовых портретах, которые для потенциала (2.4) показаны на рис. 2.16. В работе [38] дополнительно проведен численный эксперимент, в котором определены зависимости амплитуд упругих напряжений $\sigma_{el,max}$ и силы трения F_{max} от температуры T , жесткости K (см. уравнение (2.42)) и коэффициента пропорциональности k , определяющего согласно (2.29) вклад в силу трения F вязких напряжений σ_v . Проведем здесь такое исследование при параметрах модели $\alpha = 0,6$ Дж·К⁻¹/м³; $T_c = 290$ К; $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па; $b = 125$ Дж/м³; $c = 473$ Дж/м³; $h = 10^{-9}$ м; $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$ с; $A = 3 \cdot 10^{-9}$ м²; $M = 0,4$ кг; $\delta = 100$ (Па·с)⁻¹; $X_m = 0,3 \cdot 10^{-6}$ м и циклической частоте $\omega = 15$ рад/с. Указанные параметры совпадают с параметрами рис. 2.19 и рис. 2.14.

Зависимости, показанные на рис. 2.18, указывают на то, что с увеличением температуры T наблюдается уменьшение амплитуды упругих напряжений σ_{el} .

Также уменьшаются и максимальные значения силы трения F . Исследуем более

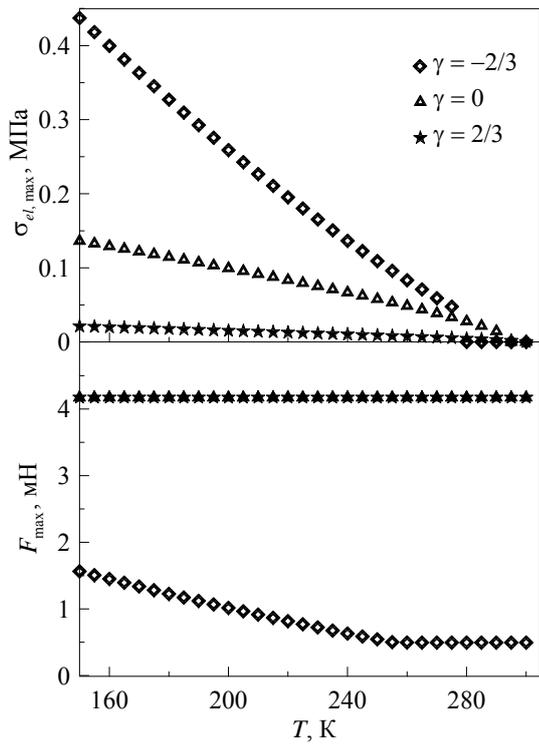


Рис. 2.25. Зависимости амплитуд упругих напряжений $\sigma_{el,max}$ и силы трения F_{max} от температуры T при $k = 10^4$ Па·с $^{\gamma+1}$ и $K = 7000$ Н/м для псевдопластической ($\gamma = -2/3$), ньютоновской ($\gamma = 0$) и дилатантной ($\gamma = 2/3$) жидкостей.

подробно зависимости амплитуд σ_{el} и F от температуры T для случая, описываемого потенциалом (2.46) в различных режимах функционирования системы. Будем определять амплитуду напряжений как $\sigma_{el,max} := (\sigma_{el,max} - \sigma_{el,min})/2$, а амплитуду силы трения как $F_{max} := (F_{max} - F_{min})/2$, где $\sigma_{el,max}$, F_{max} — максимальные значения упругих напряжений и силы трения, а $\sigma_{el,min}$, F_{min} — их минимальные значения, которые определяются в течение одного полного периода колебаний $T = 2\pi/\omega$ (см. (2.40), (2.41))

после установления стационарного режима движения. Зависимости указанных величин от температуры T для трех типов смазок (псевдопластическая жидкость при $\gamma < 0$, ньютоновская при $\gamma = 0$, и дилатантная при $\gamma > 0$) приведены на рис. 2.25.

Верхняя панель рисунка показывает, что с повышением температуры упругие напряжения $\sigma_{el,max}$ уменьшаются для всех трех типов жидкостей, то есть повышение температуры способствует плавлению смазки. Отметим, что для псевдопластических жидкостей (в нашем случае $\gamma = -2/3$), которые чаще всего используются в качестве смазок в нанотрибологических системах [208], амплитуда напряжений принимает максимальные значения почти на всем приведенном диапазоне температур, но плавление в этом случае происходит при меньших T . На нижней панели рисунка приведены зависимости амплитуд силы трения F_{max} от температуры смазки T . Из рисунка следует, что сила трения уменьшается с ростом температуры только для псевдопластических жидкостей, и она во всем диапазоне температур по сравнению с другими типами жид-

костей минимальна. Для дилатантных и ньютоновских жидкостей при выбранных параметрах максимальная сила трения с ростом температуры не изменяется. Поскольку для этих жидкостей с ростом температуры уменьшаются упругие напряжения (верхняя панель рисунка), это означает, что с ростом T растет вязкая компонента силы трения, которая определяется вторым слагаемым в формуле (2.43), что в такой ситуации может происходить только за счет увеличения относительной скорости движения контактирующих блоков ($V - v$), показанных на рис. 2.13.

Отметим, что в соответствии с рис. 2.25 для ньютоновской и дилатантной жидкостей амплитуда силы трения с повышением температуры остается постоянной даже в случае $\sigma_{el} = 0$, то есть когда смазка полностью расплавлена, а сила трения имеет лишь вязкую компоненту. Поскольку амплитуды силы F для $\gamma = 0$ и $\gamma = 2/3$ совпадают для всех температур, измерять полную силу трения в эксперименте для определения типа стационарного режима трения недостаточно, и почти всегда дополнительно изучают поведение упругих σ_{el} и вязких σ_v напряжений [153]. Отметим также, что согласно результатам, приведенным на рис. 2.25, использование псевдопластических жидкостей является оптимальным для обеспечения условий уменьшения трения, поскольку они способствуют установлению режима с минимальной силой трения F , несмотря на то, что упругие напряжения для таких смазок почти во всем диапазоне температур показывают максимальные значения.

С целью определения зависимости вязкости от градиента скорости и температуры проводятся как реальные [134], так и компьютерные [209] эксперименты. Актуальность проблемы вызвана тем, что в режиме граничного трения для наноразмерных трибологических систем зависимости вязкости от указанных величин приобретают аномальные свойства. В частности, возможен режим, в котором при криотемпературах сила трения принимает практически нулевые значения (сила трения настолько мала, что ее невозможно измерить), соответствующего малой вязкости смазки, и, соответственно, очень слабой диссипации энергии при движении. В англоязычной терминологии такой режим полу-

чил название *superlubricity* [210–213]. Исследуем зависимости силы трения и напряжений для трех типов смазок, как и на рис. 2.25, но не от температуры, а от коэффициента пропорциональности k между вязкостью и градиентом скорости (см. формулу (2.29)). На рис. 2.26 представлены указанные зависимости.

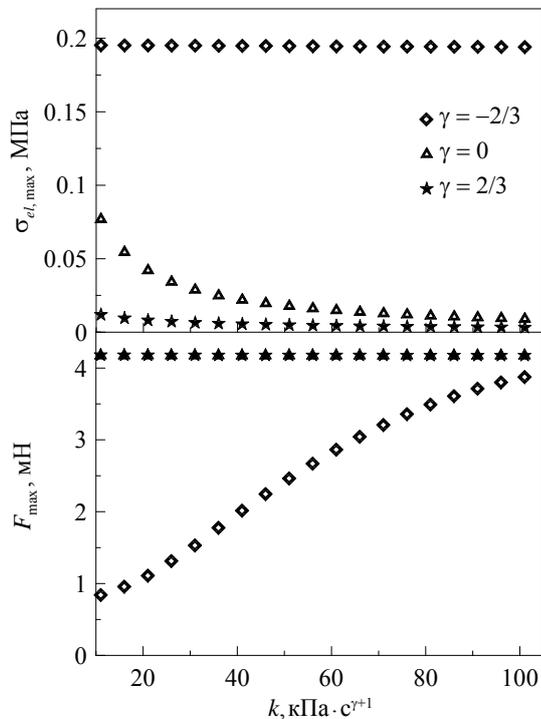


Рис. 2.26. Зависимости амплитуд упругих напряжений $\sigma_{el,max}$ и силы трения F_{max} от коэффициента пропорциональности k (2.29) при $T = 220$ К и $K = 7000$ Н/м для псевдопластической ($\gamma = -2/3$), ньютоновской ($\gamma = 0$) и дилатантной ($\gamma = 2/3$) жидкостей.

Отметим, что в отличие от рис. 2.25, различные значения k соответствуют различным смазкам, поверхностям трения, или геометрии эксперимента. Таким образом, на зависимостях, приведенных на рис. 2.26, каждая точка соответствует трибологическим системам, отличающимся по своим свойствам. Как можно видеть, для псевдопластических жидкостей ($\gamma = -2/3$) упругие напряжения с увеличением величины коэффициента k остаются постоянными. Для ньютоновских и дилатантных жидкостей максимальные напряжения с увеличением k монотонно уменьшаются. Амплитуда силы трения F_{max} в случае псевдопластической жидкости ($\gamma = -2/3$) возрастает с увеличением коэффициента k , в то время как для показателей $\gamma = 0$ и $\gamma = 2/3$ сила трения ведет себя таким же образом, как и на рис. 2.25, то есть остается постоянной. Однако, F_{max} во всем приведенном диапазоне значений k минимальна именно для псевдопластической смазки ($\gamma = -2/3$), поэтому ее использование и в этом случае является оптимальным для обеспечения условий уменьшения трения.

На рис. 2.27 показано поведение исследуемых величин с увеличением коэффициента жесткости движущих пружин K . Для дилатантных и ньютоновских жидкостей упругие напряжения $\sigma_{el,max}$ монотонно и медленно возрастают. В случае псевдопластической жидкости ($\gamma = -2/3$) напряже-

ния сначала резко увеличиваются, а дальше остаются почти постоянными.

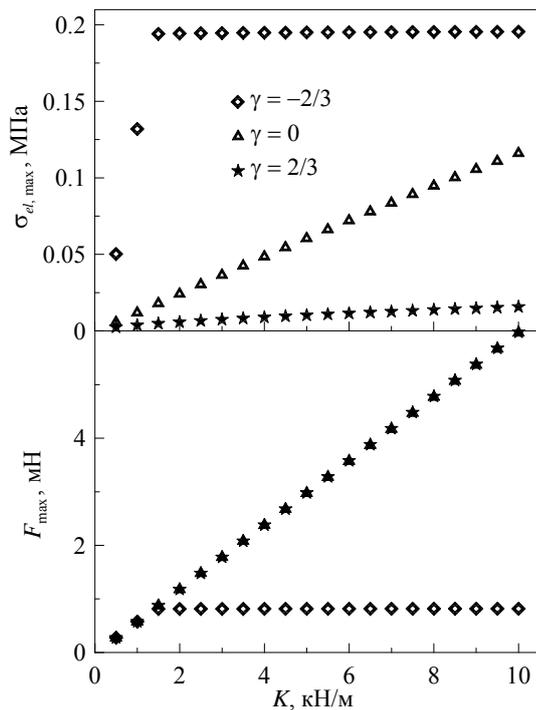


Рис. 2.27. Амплитуды напряжений $\sigma_{el,max}$ и силы трения F_{max} как функции коэффициента жесткости K (см. формулу (2.42)) при $T = 220$ К и $k = 10^4$ Па·с $^{\gamma+1}$ для псевдопластической ($\gamma = -2/3$), ньютоновской ($\gamma = 0$) и дилатантной ($\gamma = 2/3$) жидкостей.

Сила трения для показателя $\gamma = -2/3$ также возрастает до определенного значения, которое с дальнейшим увеличением коэффициента жесткости K почти не изменяется. Для показателей $\gamma = 0$ и $\gamma = 2/3$ амплитуды силы трения F_{max} линейно увеличиваются с ростом коэффициента жесткости K , причем их значения при этом одинаковые, как и на двух предыдущих рисунках. Таким образом, в рассматриваемом случае псевдопластические жидкости также обеспечивают в системе минимальную силу трения. Можно сделать общий вывод о том, что в случае использования в качестве смазок псевдопластических жидкостей реализуется оптимальный режим трения в трибологической системе, показанной на рис. 2.13, поскольку максимальная сила трения F_{max} для них принимает минимальные значения.

2.4. Фазовый переход второго рода

В подразделе 1.5.2 литературного обзора изложены основные результаты, полученные в работе [121], в которой рассматривается модель фазовых переходов второго рода. В этом подразделе диссертации проведем анализ в рамках подхода [121], который в указанной работе отсутствует.

2.4.1. Исследование гистерезиса деформаций

В работе [121] объясняется гистерезис деформаций, показанный на рис. 1.26 литературного обзора. Однако, проведенный в работе анализ строится на внеш-

нем виде представленных в работе кривых и математически сформулированный критерий наличия гистерезиса отсутствует. Поскольку это довольно важный вопрос, ведь гистерезис может быть причиной появления прерывистого режима, который является одной из основных причин разрушения трущихся деталей в наноразмерных механизмах [214, 215], нами был проведен такой анализ [216]. Приведем здесь его основные результаты.

Абсцисса экстремума зависимости $\tilde{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_{el})$ (1.83) при $\tilde{\varepsilon}_{el} < 1$, показанной на рис. 1.26, задается условием

$$\frac{d\tilde{\sigma}}{d\tilde{\varepsilon}_{el}} = \frac{3\sqrt{3}}{2} (1 - 3\tilde{\varepsilon}_{el}^2) + \tilde{\eta} = 0, \quad (2.57)$$

что приводит к зависимости

$$\tilde{\varepsilon}_{el}^* = \sqrt{\frac{1}{3} \left(1 + \frac{2\tilde{\eta}\sqrt{3}}{9} \right)}, \quad (2.58)$$

которая обобщает ранее найденную величину (1.72) (см. рис. 1.25) на случай ненулевой вязкости $\tilde{\eta} \neq 0$. Значению (2.58) соответствуют максимальные напряжения $\tilde{\sigma}^*$ в области $\tilde{\varepsilon}_{el} < 1$, величину которых легко найти прямой подстановкой выражения (2.58) в соответствующую зависимость (1.83):

$$\tilde{\sigma}^* = \left(\frac{2\tilde{\eta}}{3} + \sqrt{3} \right) \tilde{\varepsilon}_{el}^*, \quad (2.59)$$

где $\tilde{\varepsilon}_{el}^*$ задается формулой (2.58). Таким образом, мы нашли абсциссу и ординату максимума функции $\tilde{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_{el})$, показанной на рис. 1.26 в области докритических деформаций $\tilde{\varepsilon}_{el} < 1$. Обе зависимости как функции вязкости $\tilde{\eta}$ показаны на рис. 2.28. Отметим, что при нулевой вязкости реализуются значения $\tilde{\varepsilon}_{el}^*(\tilde{\eta} = 0) = \sqrt{3}/3$ и $\tilde{\sigma}^*(\tilde{\eta} = 0) = 1$, что согласуется с зависимостью, приведенной на рис. 1.25, которая построена при значении $\tilde{\eta} = 0$. С ростом вязкости $\tilde{\eta}$ рассматриваемые величины монотонно возрастают. Непрерывное плавление (отсутствие гистерезиса на рис. 1.26) будет наблюдаться, если значение критической деформации $\tilde{\varepsilon}_{el}^* > 1$. Из выражения (2.58) следует, что это неравенство выполняется, когда вязкость превышает критическую величину

$$\tilde{\eta} > \tilde{\eta}_c = 3\sqrt{3} \approx 5,196. \quad (2.60)$$

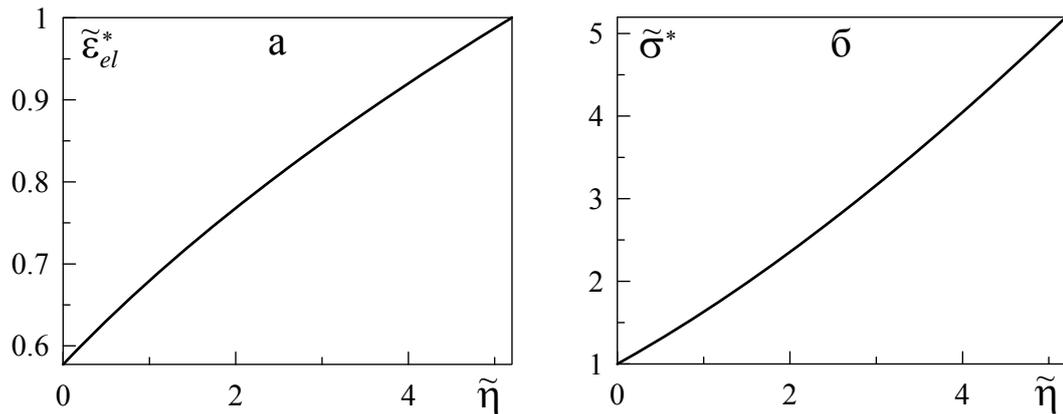


Рис. 2.28. Зависимости деформаций $\tilde{\varepsilon}_{el}^*$ (2.58) (а) и напряжений $\tilde{\sigma}^*$ (2.59) (б), соответствующих экстремумам функции $\tilde{\sigma}(\tilde{\varepsilon}_{el})$ (1.83), показанной на рис. 1.26 в области $\tilde{\varepsilon}_{el} < 1$, от безразмерного коэффициента вязкости $\tilde{\eta}$ (1.84).

Причем в критической точке максимальные напряжения численно совпадают со значением критической вязкости $\tilde{\sigma}^*(\tilde{\eta} = 3\sqrt{3}) = 3\sqrt{3}$, в чем легко убедиться прямой подстановкой значения (2.60) в выражения (2.58), (2.59). В работе [121] такой анализ не проводился, поэтому на самом деле верхняя кривая на рис. 1.26, хотя визуально и выглядит монотонной, представляет гистерезисное плавление, с пренебрежимо малой шириной гистерезиса, поскольку построена при значении вязкости $\tilde{\eta} = 5 < \tilde{\eta}_c$ (2.60).

Поскольку бóльшая часть настоящей диссертационной работы посвящена исследованию особенностей прерывистого (*stick-slip*) режима трения, который часто является следствием гистерезисного поведения, исследуем зависимости, показанные на рис. 1.26, более детально. Приведенный далее анализ также отсутствует в работе [121]. Во-первых, анализ выражений (1.83) позволяет найти координаты всех точек перехода, которые показаны на рис. 1.26. Точка 1 имеет координаты $(\tilde{\varepsilon}_{el}^*, \tilde{\sigma}^*)$, которые задаются выражениями (2.58), (2.59); точка 2 — координаты $(\tilde{\sigma}^*/\tilde{\eta}, \tilde{\sigma}^*)$; точка 3 — координаты $(1, \tilde{\eta})$; ордината точки 4 совпадает с ординатой точки 3. Абсциссу точки 4 можно определить из выражения (1.83), подставив вместо $\tilde{\sigma}$ известное значение ординаты, т.е. при решении кубического уравнения

$$\tilde{\eta} = \frac{3\sqrt{3}}{2} (1 - \tilde{\varepsilon}_{el}^2) \tilde{\varepsilon}_{el} + \tilde{\eta}\tilde{\varepsilon}_{el} \Rightarrow \frac{3\sqrt{3}}{2}\tilde{\varepsilon}_{el}^3 - \tilde{\varepsilon}_{el} \left(\tilde{\eta} + \frac{3\sqrt{3}}{2} \right) + \tilde{\eta} = 0, \quad (2.61)$$

что при использовании формул Кардано [217] приводит к значению⁸

$$\tilde{\varepsilon}_{el,4} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{8\tilde{\eta}\sqrt{3}}{9}}. \quad (2.62)$$

Поскольку мы получили аналитические выражения для координат всех критических точек, мы можем получить зависимости величины скачка деформации при прямом переходе $(\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1})$, при обратном переходе $(\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4})$, а также ширины гистерезиса $\Delta\tilde{\sigma} = (\tilde{\sigma}_1 - \tilde{\sigma}_3)$. Указанные зависимости приведены на рис. 2.29. Здесь значению $\tilde{\eta} = 0$ соответствует ситуация, детально показанная на рис. 1.25, где видно, что $(\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1}) \rightarrow \infty$, $(\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4}) = 1$, а ширина

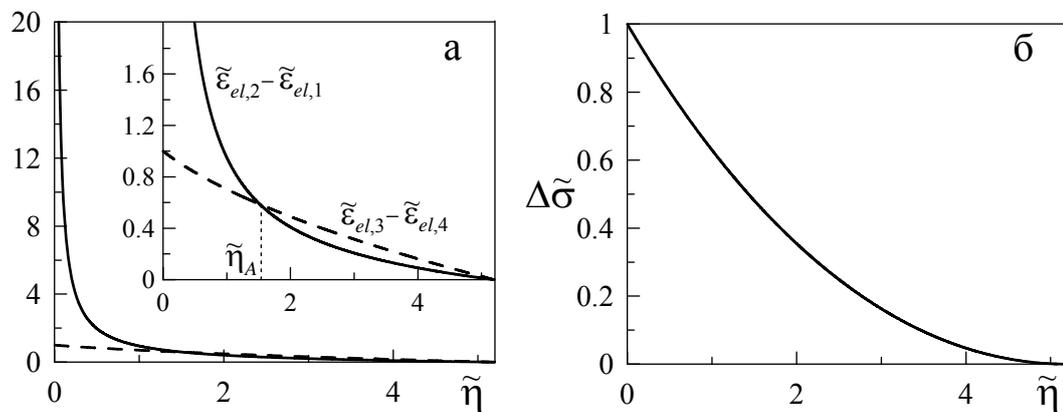


Рис. 2.29. (а) зависимости ширины прямого $(\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1})$ (сплошная линия) и обратного $(\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4})$ (пунктирная линия) переходов, показанных на рис. 1.26, как функции безразмерной вязкости $\tilde{\eta}$; (б) зависимость ширины гистерезиса по напряжениям $\Delta\tilde{\sigma} = (\tilde{\sigma}_1 - \tilde{\sigma}_3)$, показанного на рис. 1.26, от вязкости $\tilde{\eta}$.

гистерезиса по напряжениям $\Delta\tilde{\sigma} = 1$. Из рис. 2.29б следует, что с ростом вязкости $\tilde{\eta}$ ширина гистерезиса $\Delta\tilde{\sigma}$ уменьшается, пока при значении $\tilde{\eta} = \tilde{\eta}_c$ (2.60) не становится равной нулю, что соответствует непрерывному переходу. Из рис. 2.29а следует, что для значений вязкости $\tilde{\eta} < \tilde{\eta}_A$ ширина прямого перехода $(\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1})$ превышает ширину обратного $(\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4})$. В точке $\tilde{\eta} = \tilde{\eta}_A$ выполняется равенство $(\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1}) = (\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4})$, а в интервале значений вязкости $\tilde{\eta}_A < \tilde{\eta} < \tilde{\eta}_c$ наблюдается обратная ситуация, т.е. $(\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4}) > (\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1})$.

Для нахождения аналитического выражения для вязкости $\tilde{\eta}_A$ необходимо ре-

⁸Здесь и далее в этом подразделе числовой индекс при $\tilde{\varepsilon}_{el}$ и $\tilde{\sigma}$ обозначает номер точки, показанной на рис. 1.26.

шить уравнение $(\tilde{\varepsilon}_{el,2} - \tilde{\varepsilon}_{el,1}) = (\tilde{\varepsilon}_{el,3} - \tilde{\varepsilon}_{el,4})$, которое запишется как

$$\frac{\tilde{\sigma}^*}{\tilde{\eta}} - \tilde{\varepsilon}_{el}^* = 1 + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8\tilde{\eta}\sqrt{3}}{9}}. \quad (2.63)$$

После подстановки значений деформации $\tilde{\varepsilon}_{el}^*$ (2.58) и напряжений $\tilde{\sigma}^*$ (2.59) в выражение (2.63) оно приобретает явный вид

$$\frac{1}{\tilde{\eta}} \left(\frac{2\tilde{\eta}}{3} + \sqrt{3} \right) \sqrt{\frac{1}{3} \left(1 + \frac{2\tilde{\eta}\sqrt{3}}{9} \right)} - \sqrt{\frac{1}{3} \left(1 + \frac{2\tilde{\eta}\sqrt{3}}{9} \right)} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{8\tilde{\eta}\sqrt{3}}{9}}. \quad (2.64)$$

В уравнении (2.64) одна неизвестная $\tilde{\eta}$, которая и является искомым значением $\tilde{\eta}_A$. Для решения такого типа уравнений сперва необходимо избавиться от радикалов, для этого удобно правую и левую часть уравнения возвести в квадрат.

После приведения подобных получим более простое уравнение вида

$$\frac{104\sqrt{3}}{243} \tilde{\eta}^3 + \frac{47}{9} \tilde{\eta}^2 - 2 = \tilde{\eta}^2 \sqrt{9 + 8\sqrt{3}\tilde{\eta}}. \quad (2.65)$$

Снова возводя правую и левую части в квадрат и приводя подобные, получим

$$2704\tilde{\eta}^6 - 17370\sqrt{3}\tilde{\eta}^5 + 89910\tilde{\eta}^4 - 8424\sqrt{3}\tilde{\eta}^3 - 102789\tilde{\eta}^2 + 19683 = 0. \quad (2.66)$$

Уравнение (2.66) имеет корни $\tilde{\eta}_{1,2} = 3\sqrt{3}$ и $\tilde{\eta}_3 = -3\sqrt{3}/8$, что легко проверить прямой подстановкой. Значение $\tilde{\eta} = 3\sqrt{3}$ – это вязкость $\tilde{\eta}_c$ (2.60), при которой кривые на рис. 2.29а пересекаются второй раз, поэтому оно не является искомой величиной $\tilde{\eta}_A$, а отрицательное значение вязкости $\tilde{\eta} = -3\sqrt{3}/8$ вообще не имеет физического смысла.

Если поделить многочлен, составляющий уравнение (2.66), два раза на $(\tilde{\eta} - 3\sqrt{3})$ и один раз на $(\tilde{\eta} + 3\sqrt{3}/8)$, получим кубическое уравнение

$$338\tilde{\eta}^3 - 270\sqrt{3}\tilde{\eta}^2 - 162\tilde{\eta} + 81\sqrt{3} = 0. \quad (2.67)$$

Уравнение (2.67) имеет три вещественных корня, это так называемый ”неприводимый случай“, в котором формулы Кардано для решения не подходят. Применение тригонометрической формулы Виета [217] для искомой величины $\tilde{\eta}_A$ дает значение

$$\tilde{\eta}_A = \frac{3\sqrt{3}}{169} \left(2\sqrt{394} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left(\frac{149\sqrt{394}}{620944} \right) \right] + 15 \right) \approx 1,519. \quad (2.68)$$

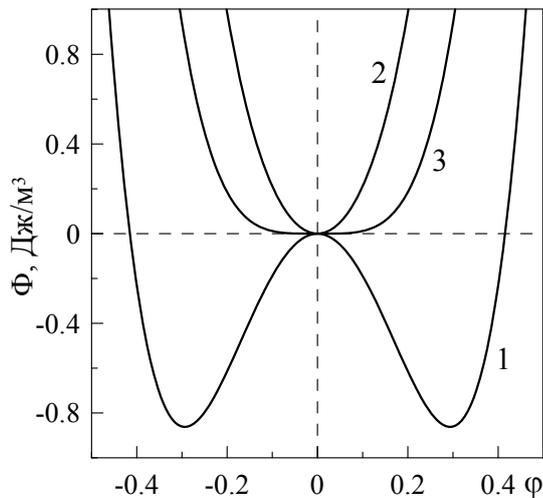
2.4.2. Свободная энергия и стационарная сила трения

В работе [39] нами проведено исследование кинетики трибологической системы, показанной на рис. 1.21, в рамках модели фазового перехода второго рода. При этом использовался термодинамический потенциал вида [121]

$$\Phi = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 + \frac{b}{4}\varphi^4. \quad (2.69)$$

По сравнению с потенциалом (1.67), который использовался в изначальной работе [121], здесь добавлен коэффициент a , а также изменен множитель перед φ^4 , что упрощает получаемые далее формулы, не меняя при этом поведения системы ни количественно, ни качественно. В стационарном случае условие $\partial\Phi/\partial\varphi = 0$ приводит к уравнению

$$\varphi^2 + \left[\frac{2\alpha(T - T_c)}{b} + \frac{a}{b}\varepsilon_{el}^2 \right] = 0, \quad (2.70)$$



которое определяет симметричные экстремумы зависимости $\Phi(\varphi)$ (2.69):

$$\varphi_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{b} - \frac{a}{b}\varepsilon_{el}^2}. \quad (2.71)$$

Из уравнения (2.71) следует, что безразмерный параметр порядка φ принимает максимальное значение $\varphi_{\max} = 1$ при $T = 0$ и $V = 0$, если выполняется равенство (ср. с (2.9) и (2.49))

$$b - 2\alpha T_c = 0, \quad (2.72)$$

Рис. 2.30. Зависимость плотности свободной энергии Φ (2.69) от параметра порядка φ при $\alpha = 0,8 \text{ Дж}\cdot\text{К}^{-1}/\text{м}^3$, $T_c = 290 \text{ К}$, $a = 2 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $b = 464 \text{ Дж}/\text{м}^3$, $\tau_{\varepsilon} = 10^{-7} \text{ с}$, $h = 10^{-9} \text{ м}$, $V = 200 \text{ нм}/\text{с}$. Кривые 1 и 2 соответствуют температурам $T = 260 \text{ К}$ и 310 К . Кривая 3 построена при $T = T_{c0}$ (2.73).

согласно которому далее и выбираются постоянные разложения. На рис. 2.30 изображена плотность свободной энергии (2.69) для трех значений температуры T . Согласно рисунку, при температуре $T < T_{c0}$ (кривая 1) смазка твердоподобна, поскольку реализуется ненулевое стационарное значение параметра порядка $\varphi_0 \neq 0$. Если же температу-

ра выше критического значения $T > T_{c0}$ (кривая 2), смазка жидкоподобна, поскольку устанавливается нулевое стационарное значение параметра φ_0 . Критическое значение температуры T_{c0} легко находится из выражения (2.71) при $\varphi_{\pm} = 0$:

$$T_{c0} = T_c - \frac{a\varepsilon_{el}^2}{2\alpha}. \quad (2.73)$$

Кривая 3 на рис. 2.30 соответствует значению температуры $T = T_{c0}$, при котором на зависимости $\Phi(\varphi)$ (2.69) появляется плато.

Упругие напряжения σ_{el} , как и ранее, определяются выражением (2.5), а модуль сдвига $\mu = a\varphi^2$ (2.6) в рассматриваемом случае приобретает вид

$$\mu = \frac{a}{b} (2\alpha(T_c - T) - a\varepsilon_{el}^2). \quad (2.74)$$

Согласно выражению (2.74) критическое значение упругой деформации $\varepsilon_{el,c}$ запишется как (ср. с (1.70))

$$\varepsilon_{el,c} = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}. \quad (2.75)$$

При выполнении условия $\varepsilon_{el} > \varepsilon_{el,c}$ (2.75) происходит плавление смазочного материала, поскольку модуль сдвига μ (2.74) становится нулевым. Таким образом, зависимость напряжений от деформаций принимает вид (ср. с (1.71)):

$$\sigma_{el} = \mu\varepsilon_{el} = \begin{cases} \frac{a [2\alpha(T_c - T) - a\varepsilon_{el}^2]}{b} \varepsilon_{el}, & \varepsilon_{el} < \varepsilon_{el,c}, \\ 0, & \varepsilon_{el} > \varepsilon_{el,c}. \end{cases} \quad (2.76)$$

Зависимость (2.76) качественно совпадает с приведенной на рис. 1.25, поэтому здесь ограничимся только формулой, без соответствующего графического представления. Используя (2.16), из выражения (2.73) легко получить критические значения скорости сдвига и температуры в виде

$$V_{c0} = \frac{h}{\tau_{\varepsilon}} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}, \quad (2.77)$$

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_{\varepsilon} V}{h} \right)^2. \quad (2.78)$$

По сравнению с фазовым переходом первого рода, который рассмотрен в подразделах 2.2 и 2.3 диссертационной работы, в рассматриваемом случае фазового перехода второго рода потенциальный барьер на зависимости $\Phi(\varphi)$ (2.69)

отсутствует, поэтому критические скорости (температуры), при которых смазочный материал плавится и затвердевает, совпадают, и задаются выражениями (2.77), (2.78).

Из условия $\partial\sigma_{el}/\partial\varepsilon_{el} = 0$, приводящего при использовании выражения (2.76) к уравнению

$$2\alpha(T_c - T) - 3a\varepsilon_{el}^2 = 0 \Rightarrow \varepsilon_{el} = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{3a}}, \quad (2.79)$$

легко найти скорость V^* , при которой упругие напряжения достигают максимального значения (ср. с (1.72)):

$$V^* = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{3a}}. \quad (2.80)$$

Соответствующее максимальное значение упругих напряжений σ_{el}^* можно получить, если значение ε_{el} (2.79) подставить в (2.76) (ср. с (1.73)):

$$\sigma_{el}^* = \frac{2\sqrt{a}}{b} \left[\frac{2\alpha(T_c - T)}{3} \right]^{3/2}. \quad (2.81)$$

Таким образом, напряжения σ_{el} с ростом скорости V увеличиваются, достигают максимального значения (2.81) в точке $V = V^*$ (2.80), а затем уменьшаются, и при превышении критического значения V_{c0} (2.77) становятся нулевыми. С дальнейшим ростом скорости сдвига отличной от нуля остается только вязкая составляющая напряжений σ_v (2.29).

Зависимости стационарных значений силы трения (2.30) от температуры T и скорости V , соответствующие потенциалу (2.69), приведены на рис. 2.31 (ср. с рис. 2.7 и рис. 2.22), на котором штриховые кривые отвечают жидкоподобной структуре смазки, а сплошные — твердоподобной. При фиксированном значении скорости V (рис. 2.31а), поскольку в рассматриваемом случае температура T входит в (2.76) в первой степени, имеем линейную зависимость силы трения от температуры. Как можно видеть из кривой 1 на рисунке, построенной при значении скорости $V_1 = 500$ нм/с, сила трения уменьшается с ростом температуры, и при превышении температурой критического значения $T > T_{c0}$ (2.78) смазка плавится, а упругая составляющая напряжений при этом становится равной

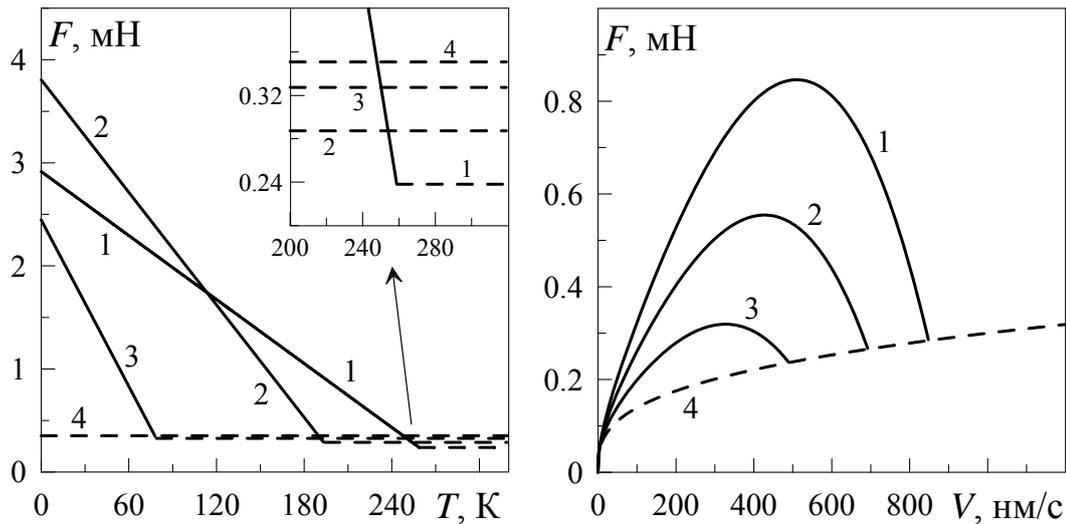


Рис. 2.31. Зависимости силы трения F (2.30) от температуры T и скорости сдвига V при параметрах рис. 2.30 и $\gamma = -2/3$, $A = 3 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$, $k = 10^4 \text{ Па} \cdot \text{с}^{1/3}$: (а) кривые 1–4 соответствуют скоростям сдвига $V_{1-4} = 500, V^* \approx 879$ (2.80), 1300, 1600 нм/с; (б) кривые 1–4 соответствуют температурам $T_{1-4} = 200, 230, 260, 300 \text{ К}$. На вставке к рис. 2.31а показан его увеличенный фрагмент.

нулю. При дальнейшем увеличении температуры сила трения имеет лишь вязкую составляющую (второе слагаемое в скобках в формуле (2.30)). Кривая 2 на рисунке построена при большем значении скорости $V_2 = V^*|_{T=0} \approx 879 \text{ нм/с}$. Здесь мы видим максимальное значение силы F при $T = 0$ по отношению к другим представленным кривым. Из рисунка следует, что с увеличением скорости сдвига V смазка плавится при меньших температурах T , что согласуется с выражением (2.78). Кривая под номером 4 на рис. 2.31а построена при значении скорости $V_4 > V_{c0}|_{T=0}$, когда смазка при любой температуре имеет жидкоподобную структуру. С дальнейшим ростом скорости сила трения при этом не зависит от температуры, поскольку в рассматриваемом случае учитывается зависимость эффективной вязкости только от скорости сдвига.

На рис. 2.31б показаны зависимости силы трения F от скорости сдвига V при фиксированных значениях температуры T . Здесь, в соответствии с формулой (2.30), на начальном этапе сила трения F растет за счет роста упругой и вязкой компонент напряжений. При превышении скоростью значения V^* (2.80) упругая компонента напряжений σ_{el} убывает, а вязкая σ_v продолжает увеличиваться. При выполнении условия $V > V_{c0}$ смазка плавится, поэтому дальней-

шее увеличение силы трения F осуществляется только за счет роста вязких напряжений (второе слагаемое в формуле (2.30)). При более высокой температуре (кривая 2), согласно выражению (2.81), максимальное значение силы трения уменьшается. Если же температура $T > T_c$ (см. разложение (2.69)), смазочный материал жидкоподобен при любых скоростях сдвига V , а сила трения имеет лишь вязкую компоненту. Отметим, что после плавления значения F для всех температур совпадают, поскольку в рассматриваемом случае после плавления сила трения F становится независимой от T . В общем случае необходимо учитывать зависимость эффективной вязкости смазки η_{eff} не только от градиента скорости, но также и от температуры [209], тогда эти кривые после плавления показывают различное поведение [36]. Такое исследование проведено в разделе 3 диссертационной работы, где показано, что после плавления сила трения продолжает уменьшаться с ростом температуры за счет уменьшения эффективной вязкости смазочного материала. Кривые, представленные на рис. 2.31, не способны отразить полную картину трения, поскольку они являются лишь срезом трехмерной поверхности плоскостями $V = \text{const}$ и $T = \text{const}$.

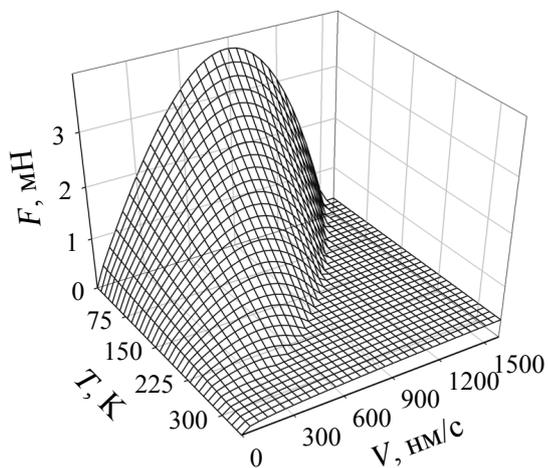


Рис. 2.32. Трехмерная зависимость силы трения $F(V, T)$ (2.30) при параметрах рис. 2.31.

На рис. 2.32 дополнительно приведена трехмерная зависимость $F(V, T)$ от обоих управляющих параметров. Эта зависимость подтверждает сделанные ранее выводы и представляет собой обобщенную на граничный режим трехмерную диаграмму Герси — Штрибека. Отметим, что хотя на зависимости на рис. 2.32 и отсутствует гистерезисный участок, поскольку рассматривается модель фазового перехода второго рода [155], в кинетическом случае прерывистый режим все же наблюдается, за счет медленной релаксации параметра порядка после обеспечения условий, необходимых для плавления [32].

блюдается, за счет медленной релаксации параметра порядка после обеспечения условий, необходимых для плавления [32].

2.4.3. Влияние изменения управляющих параметров

Для потенциала (2.69) соответствующее кинетическое уравнение (2.34) запишется в виде

$$\dot{\varphi} = -\delta (2\alpha(T - T_c)\varphi + a\varphi\varepsilon_{el}^2 + b\varphi^3) + \xi(t). \quad (2.82)$$

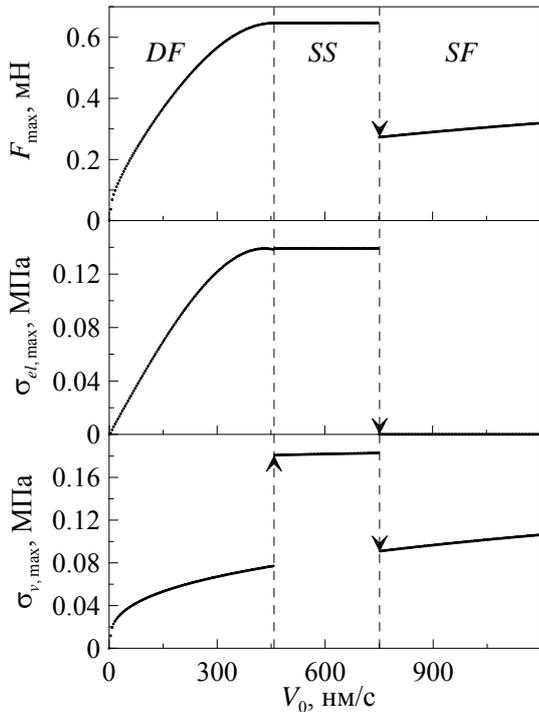


Рис. 2.33. Зависимости максимальных значений силы трения F_{\max} , упругих $\sigma_{el,\max}$ и вязких $\sigma_{v,\max}$ напряжений от скорости свободного конца пружины V_0 при параметрах рис. 2.31 и $M = 0,4$ кг, $K = 1500$ Н/м, $\delta = 100$ (Па·с) $^{-1}$, $T = 220$ К.

Исследование кинетики трибологической системы, показанной на рис. 1.21, проведенное в работе [39] (см. также [218]), показало, что кинетические зависимости качественно повторяют зависимости для фазового перехода первого рода, приведенные на рис. 2.9 и рис. 2.10. Другими словами, несмотря на то, что потенциал (2.69) не учитывает гистерезисное поведение, он также приводит к возникновению прерывистого движения, как и в случае фазового перехода первого рода, который рассмотрен в данной диссертационной работе на основе разложений свободной энергии (2.4) и (2.46). Однако, в случае фазового перехода второго рода реализуется другой механизм прерывистого движения, связанный с релаксационными процессами. Если варьировать значение кинетического коэффициента δ , который отвечает за

инерционные свойства системы, легко добиться режима, когда модели фазового перехода первого и второго рода будут давать различные результаты. Исследование влияния изменения скорости V_0 и температуры T на процесс плавления в случае фазового перехода второго рода дает результаты, аналогичные представленным на рис. 2.11 и рис. 2.12 [39, 218]. В работе [39] проведено дополнительное исследование зависимости максимальных значений силы трения F_{\max} , а также упругих $\sigma_{el,\max}$ и вязких $\sigma_{v,\max}$ напряжений от скорости внешнего при-

вода V_0 . На рис. 2.33 изображены полученные зависимости. В режимах сухого (DF), прерывистого (SS) и жидкостного (SF) трения зависимость $F(t)$ подобна зависимостям, изображенным на рис. 2.11 и рис. 2.12. При выбранной температуре и малых скоростях движения внешнего привода в системе реализуется режим сухого трения (DF). С ростом скорости V_0 увеличивается величина натяжения пружины ΔX и наступает момент, когда режим сухого трения переходит в прерывистый (*stick-slip*) режим движения. Поскольку при этом происходит периодическое плавление/затвердевание смазочного материала, скорость блока во время движения изменяется на несколько порядков, и максимальное значение вязкой компоненты напряжений (2.29) существенно возрастает (нижняя панель на рис. 2.33) по сравнению с сухим трением (DF). Упругие напряжения с увеличением V_0 достигают своих максимальных значений σ_{el}^* (2.81). С дальнейшим ростом V_0 наступает момент, когда минимальная скорость $V_{\min} > V_{c0}$ (2.77), и смазка при этом уже не затвердевает. Эта ситуация соответствует режиму жидкостного трения (SF). Отметим, что подобная картина наблюдается и для зависимости силы трения при увеличении температуры смазочного материала T при фиксированной скорости сдвига.

2.5. Сравнение граничного режима трения с сухим и гидродинамическим режимами

В работе [47] рассматриваются три случая: сухой режим трения, гидродинамический и граничный, и проводится сравнение указанных режимов на основе моделирования системы, показанной на рис. 2.13, с тем отличием, что в модели учитывается нагрузка L , приложенная к верхнему трущемуся блоку. Такие системы, работающие в различных режимах, имеют большое прикладное значение, поскольку широко используются в различных механизмах [204–206]. Приведем здесь основные результаты проведенного в работе моделирования.

2.5.1. Сухое трение

В случае сухого трения для моделирования использовались уравнения (2.40), (2.41) и (2.42), где сила трения F определялась законом Амонтона [219–222] в виде

$$F = \mu_{fr} L \operatorname{sgn}(V - v), \quad (2.83)$$

где μ_{fr} – коэффициент трения, а L – внешняя нагрузка. Для учета направления действия силы в (2.83) введена знаковая функция (1.44).

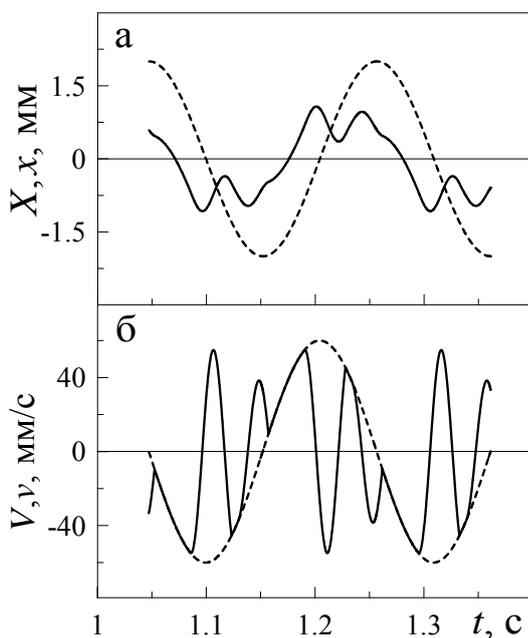


Рис. 2.34. Зависимости координат и скоростей трущихся блоков, показанных на рис. 2.13 от времени t при параметрах $X_m = 2 \cdot 10^{-3}$ м, $\omega = 30$ рад/с, $L = 20$ Н, $M = 0,6$ кг, $K = 7000$ Н/м, $\mu_{fr} = 0,5$.

Результат численного решения уравнений показан на рис. 2.34. На рис. 2.34а штриховой линией показана зависимость координаты верхнего трущегося блока $X(t)$ (2.40), а сплошной – координата нижнего блока $x(t)$. На зависимости $x(t)$ присутствуют дополнительные гармоники, ввиду чего она имеет более сложный вид. На рис. 2.34б приведены зависимости скоростей трущихся блоков от времени. Стоит отметить, что наблюдаются продолжительные моменты времени, в течение которых эти кривые накладываются одна на другую. Это означает, что блоки движутся с одинаковыми скоростями, т.е. в эти моменты времени $V = v$. Такие ситуации соответствуют случаям, когда трущиеся блоки ”прилипают“ друг к другу. При этом отсутствует их относительное перемещение.

Когда скорости V и v не совпадают, осуществляется режим скольжения. То есть в сухом режиме трения реализуется прерывистое движение, наличие которого показывают и многочисленные экспериментальные и теоретические работы по исследованию граничного режима [12, 88, 110]. К примеру, исследование системы, показанной на рис. 2.13 в граничном режиме, ре-

зультаты которого проиллюстрированы на рис. 2.14, также показывает прерывистый режим. Ранее многими авторами неоднократно указывалось, что граничный режим по своим свойствам ближе скорее к сухому трению [11, 223], чем к гидродинамическому.

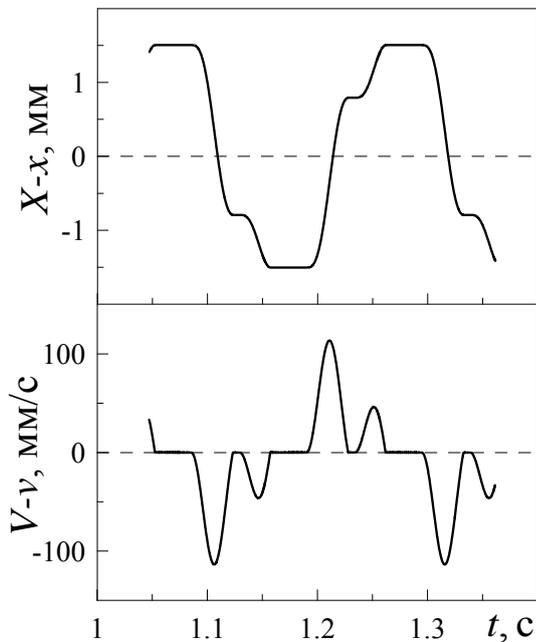


Рис. 2.35. Зависимости относительно-го перемещения $X(t) - x(t)$ и относительной скорости $V(t) - v(t)$ трущихся блоков от времени t , соответствующие рисунку 2.34.

На рис. 2.35 дополнительно приведены временные зависимости относительного перемещения блоков $X(t) - x(t)$ и их относительной скорости $V(t) - v(t)$, которые соответствуют зависимостям, показанным на рис. 2.34. Здесь в моменты времени, когда осуществляется прилипание, относительное перемещение $(X - x)$ остается постоянным, а относительная скорость $(V - v)$ равна нулю. Таким образом, реализуется периодический прерывистый режим движения (*stick-slip*), который характерен для сухого трения без смазки при выполнении определенных условий [11]. При выбранных параметрах за один полный период блоки 4 раза "прилипают" друг к другу — по 2 раза при

движении в каждом из направлений, причем полученные зависимости симметричны относительно направления движения. Зависимости на рис. 2.34 и рис. 2.35 показаны в стационарном режиме, когда параметры системы со временем не изменяются. При расчетах выбирались нулевые начальные значения величин, и зависимости приводились с момента времени $t = 5T$, где $T = 2\pi/\omega$ — период функции (2.40). За указанное время устанавливается стационарный режим движения. Зависимости приведены на временном интервале $\Delta t = 1,5T$. Отметим, что рис. 2.35 имеет общие моменты с аналогичным рисунком 2.15, построенным для случая граничного трения, с тем отличием, что рис. 2.15 показывает большее количество переходов от прилипания к проскальзыванию за один период. В системе с сухим трением согласно выражению (2.83) сила трения зависит только

от произведения нагрузки на коэффициент трения $\mu_{fr}L$, в то время как в режиме граничного трения гораздо больше параметров, поэтому такие системы являются более перспективными с точки зрения создания управляемого движения на наномасштабах [224, 225], поскольку изменением соотношений между внутренними параметрами можно получить различные режимы функционирования.

Отметим, что на поведение системы сильное влияние оказывает величина нагрузки на верхний трущийся блок L , а также частота ω . Подробное изучение влияния этих параметров, а также ряда других на режим сухого трения без смазки проведено экспериментально [204], и поэтому не является целью настоящей диссертационной работы. Однако, для общности приведем стационарные зависимости на фазовой плоскости $\dot{x}(x)$ (либо $v(x)$), которые отсутствуют в [204]. Фазовые портреты системы при параметрах рис. 2.34 и различных значениях циклической частоты ω представлены на рис. 2.36. Из рисунка видно, что с ростом

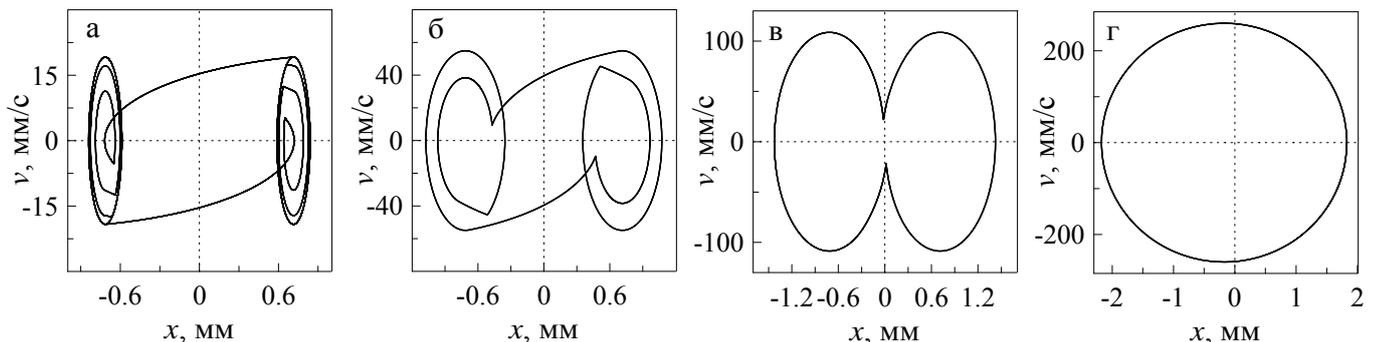


Рис. 2.36. Фазовые портреты системы на плоскости $\dot{x}(x)$, соответствующие параметрам рис. 2.34 и частотам ω : (а) 10; (б) 30; (в) 80; (г) 130 рад/с.

частоты поведение системы упрощается, поскольку уменьшается общее количество гармоник. При значении частоты $\omega = 130$ рад/с (рис. 2.36г) поверхности находятся в "прилипшем" состоянии в продолжении всего времени движения, о чем свидетельствует вид соответствующего фазового портрета. На нем осуществляется периодическое движение по закону (2.40). Отметим, что фазовый портрет на рис. 2.36б построен при значении частоты $\omega = 30$ рад/с, что соответствует временным зависимостям, показанным на рис. 2.34. Также отметим тот факт, что все фазовые портреты симметричны относительно начала координат, кроме последнего, демонстрирующего случай полного "прилипания" поверхностей. Это свя-

зано с тем, что во всех случаях, когда присутствуют моменты проскальзывания, система на начальном этапе эволюционирует, и устанавливается стационарный режим с симметричными зависимостями. В последнем случае при $\omega = 130$ рад/с уже в начале движения и во все последующее время поверхности находятся в состоянии "прилипания", что не дает системе выйти на симметричный относительно направления сдвига стационарный режим трения. При этом поведение в любой момент времени зависит от начального положения трущихся блоков (начальных условий в уравнениях), поскольку это положение с течением времени сохраняется. Отметим, что фазовые портреты, соответствующие граничному режиму трения (рис. 2.16) для всех выбранных значений циклических частот ω имеют более сложный вид.

2.5.2. Жидкостное трение

Если две поверхности, образующие пару трения, разделены слоем смазки толщиной на порядок больше высот микронеровностей, наступает гидродинамический режим. Сила трения в таком жидкостном режиме определяется согласно закону Ньютона (1.5):

$$F = \eta A \frac{V}{h}, \quad (2.84)$$

где η — динамическая вязкость смазочного материала, A — площадь соприкосновения трущихся поверхностей, h — толщина смазочного слоя, а V — скорость течения вязкой смазки [226]. Согласно формуле (2.84) сила гидродинамического трения не зависит от нагрузки на поверхности L . Однако, от нагрузки существенно зависит толщина смазочного слоя и вязкость смазки [209]. При прочих равных условиях в гидродинамическом режиме сила трения приблизительно на два порядка меньше сил граничного и сухого трения. Из выражения (2.84) следует, что сила трения F пропорциональна относительной скорости сдвига трущихся поверхностей, однако эта ситуация выполняется только для ньютоновских жидкостей, вязкость которых η зависит лишь от свойств смазочного материала и его

температуры. При использовании (1.4) и аппроксимации (2.28) формула (2.84) переписывается в виде

$$F = kA \left(\frac{V}{h} \right)^{\gamma+1}. \quad (2.85)$$

Формула (2.85) совпадает с вкладом вязкой силы трения в граничном режиме, которая дается вторым слагаемым в скобках в выражении (2.30). Для дальнейшего моделирования используем формулу для силы трения в виде

$$F = \bar{m} \cdot \text{sgn}(V - v) \cdot |V - v|^{\gamma+1}, \quad (2.86)$$

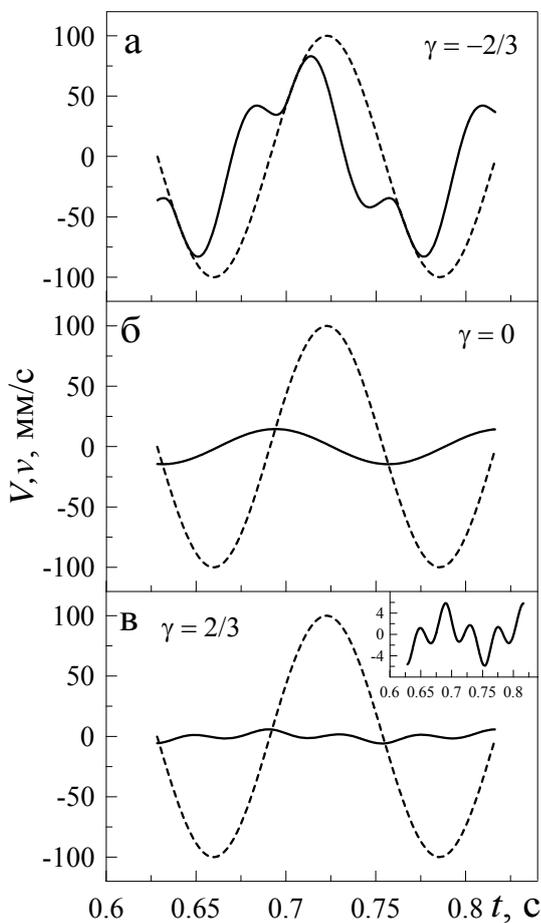


Рис. 2.37. Зависимости скоростей V , v от времени t при параметрах $X_m = 2 \cdot 10^{-3}$ м, $\omega = 50$ рад/с, $M = 0,6$ кг, $K = 5000$ Н/м, $\bar{m} = 25 \text{ Па} \cdot \text{с}^{\gamma+1} \cdot \text{м}^{1-\gamma}$. (а) $\gamma = -2/3$; (б) $\gamma = 0$; (в) $\gamma = 2/3$.

где введен коэффициент пропорциональности

$$\bar{m} = \frac{kA}{h^{\gamma+1}}, \quad (2.87)$$

измеряющийся в единицах $\text{Па} \cdot \text{с}^{\gamma+1} \cdot \text{м}^{1-\gamma}$, а также знаковая функция (1.44) и относительная скорость трущихся поверхностей $(V - v)$.

На рис. 2.37 приведены временные зависимости скоростей трущихся блоков, полученные в результате совместного численного решения уравнений (2.41) и (2.42), при определении силы трения F согласно выражению (2.86). Панели рисунка, расположенные сверху вниз, отвечают значениям $\gamma = -2/3; 0; 2/3$. Штриховыми линиями показана скорость верхнего блока $V(t)$, сплошными — нижнего $v(t)$. На вставке на рис. 2.37в показана увеличенная зависимость $v(t)$. На рисунке показаны три случая, причем все они рассматриваются при одинаковых параметрах, с отличием только в значении коэффициента γ . Это позволяет проанализировать его влияние на поведение трибологической системы, изображенной

изображенной

на рис. 2.13. В первом случае (панель а) в качестве смазки выбрана неньютоновская псевдопластическая жидкость ($\gamma = -2/3 < 0$). При выбранных параметрах реализуется прерывистый режим движения. Отметим, что псевдопластические полимерные смазки широко используются при экспериментальном исследовании граничного трения [12, 134], и в определенном диапазоне параметров действительно показывают прерывистый режим [12]. В случае обычной ньютоновской жидкости (панель б, $\gamma = 0$) устанавливается режим устойчивого скольжения, о чем свидетельствует малое значение скорости v , причем зависимость $v(t)$ изменяется по закону синуса, так же как и $V(t)$ (2.41), только со сдвигом по фазе. Причина отсутствия дополнительных гармоник в полученной $v(t)$ состоит в линейной зависимости силы трения F (2.86) от относительной скорости сдвига поверхностей при $\gamma = 0$. И наконец, в последнем рассматриваемом случае (рис. 2.37в) как смазка используется дилатантная жидкость ($\gamma = 2/3 > 0$). На вставке к рисунку легко видеть, что зависимость $v(t)$ при этом приобретает более сложный вид за счет нелинейности (2.86), однако в результате реализуется жидкостное трение [226].

2.6. Выводы к разделу 2

1. В результате рассмотрения поведения граничной смазки, зажатой между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями, определены аналитические выражения для критических значений температур и скоростей, при которых наблюдается плавление и затвердевание, представленные как фазовые переходы первого либо второго рода. При исследовании кинетики трибологической системы показано, что возможна реализация трех случаев: смазка в процессе трения твердоподобна, находится в жидкоподобном состоянии, либо реализуются переходы плавление/затвердевание, приводящие к прерывистому движению. Объяснены причины, приводящие к прерывистому режиму движения.

2. На примере трибологической системы, состоящей из двух контактирующих блоков, один из которых закреплен между двумя пружинами, а другой приведен в непрерывное периодическое движение, установлено, что для псевдопластиче-

ских жидкостей с ростом температуры смазки упругие напряжения и сила трения в системе уменьшаются. Для сравнения приведены результаты расчетов для дилатантных и ньютоновских жидкостей. Найдены режимы, в которых поведение системы зависит от направления перемещения верхнего трущегося блока, что соответствует реализации в системе эффектов памяти.

3. Выяснено, что с повышением температуры смазки и скорости сдвига прерывистый режим трения исчезает и устанавливается кинетический режим скольжения с постоянной скоростью. Показано, что при увеличении скорости сдвига в системе увеличивается частота фазовых переходов между жидкоподобным и твердоподобным состояниями, что подтверждается многими экспериментами.

Результаты, представленные в данном разделе диссертации, опубликованы в статьях [35, 38–41, 43, 47, 48], статьях в материалах конференций [57, 59, 61] и тезисах докладов на конференциях [67–69, 74, 76–79].

РАЗДЕЛ 3

ОПИСАНИЕ ЭФФЕКТОВ ПАМЯТИ ПРИ УЧЕТЕ УНИВЕРСАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ СМАЗОЧНОГО МАТЕРИАЛА ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ И ГРАДИЕНТА СКОРОСТИ

В разделе 2 диссертационной работы проведено описание особенностей граничного режима трения на основе термодинамической модели в случаях фазового перехода первого и второго рода. При описании зависимости эффективной вязкости от градиента скорости использовалось выражение (2.28), многократно подтвержденное как экспериментально [134], так и компьютерным моделированием [209]. Указанная зависимость позволила адекватно описать наблюдаемое экспериментально поведение трибологических систем двух типов при изменении скорости и температуры. Однако известно, что эффективная вязкость смазочного материала на самом деле зависит не только от градиента скорости, но и от температуры смазочного материала. Для определения универсальной зависимости вязкости от температуры и скорости сдвига необходимо обобщить данные большого количества экспериментов, проведенных при равных иных условиях. На сегодняшний день нам известна единственная работа подобного рода, опубликованная в 2012 году [209], в которой предложена такая зависимость для ультратонких слоев на основе обобщения большого количества компьютерных экспериментов. Данный раздел диссертации обобщает результаты, представленные в разделе 2. Проведено описание некоторых экспериментально наблюдаемых эффектов на основе такого подхода. В частности, в разделе описываются экспериментально наблюдаемые эффекты памяти, которые появляются в модели естественным образом при введении в рассмотрение зависимости вязкости от температуры. Также в разделе представлены результаты работы, в которой эффекты памяти описаны с использованием ранее записанного выражения для эффективной вязкости (2.28) при модификации термодинамического потенциала (2.46). Оба подхода показывают аналогичное поведение трибологической системы.

3.1. Описание зависимости вязкости от температуры

При проведении экспериментов по граничному трению исследуемые смазочные материалы обычно представляют собой полимерные растворы и расплавы [12, 227]. Это связано с тем, что смазка не должна выдавливаться из-под поверхностей в ходе эксперимента, чего легче достигнуть при использовании длинных полимерных молекул. Такие смазки представляют собой неньютоновские псевдопластические жидкости. Для псевдопластических жидкостей, в отличие от дилатантных, вязкость η_{eff} с ростом $\dot{\epsilon}$ уменьшается (см. формулу (2.28)), что способствует уменьшению трения.

В работе Сивебаека, Самойлова и Перссона [209] при обобщении большого количества результатов, полученных методами молекулярной динамики, детально исследована зависимость вязкости η_{eff} линейных алканов, которые в своем составе содержали от 20 до 1400 атомов углерода, от температуры T и скорости деформации $\dot{\epsilon}$. Измерения проводились в широком диапазоне температур T от 0 до 900 К. Объектом исследования служил слой смазочного материала толщиной $h \sim 3$ нм, содержащий от 6 до 8 молекулярных монослоев, зажатых между гладкими твердыми телами, что соответствует рассматриваемому в предлагаемой работе объекту. Это позволило авторам работы [209] получить универсальную зависимость вида:

$$\log \eta_{eff} = C - n \log \dot{\epsilon}, \quad (3.1)$$

где параметры C и n зависят от температуры смазки T . Из (3.1) видно, что при малых T в состоянии покоя $\dot{\epsilon} = 0$ эффективная вязкость η_{eff} обращается в бесконечность, что соответствует твердоподобной смазке, однако это не приводит к резкому увеличению силы трения, поскольку, согласно (1.78), (2.26), (2.27) в состоянии покоя $\dot{\epsilon} = 0$ ее вязкая компонента обращается в ноль.

В [209] показано, что твердоподобной смазке при малых температурах соответствует значение $n = 1$, в то время как при повышении температуры смазка показывает стандартное ньютоновское поведение с параметром $n = 0$. Для опи-

сания этой особенности авторы предлагают зависимость вида

$$n = \frac{1}{1 + (T/T_k)^\beta}, \quad (3.2)$$

где введенные в рассмотрение феноменологические постоянные T_k и β зависят от вида используемого полимера. В частности, для эйкозана $C_{20}H_{42}$ эти параметры составляют $T_k = 353$ К, $\beta = 4,09$ [209].

Зависимость $C(n)$ для всех исследуемых типов полимерных смазок может быть приблизительно выражена равенством [209]:

$$C = 10,9n - 3,8. \quad (3.3)$$

Вместе выражения (3.1) – (3.3) дают зависимость вязкости η_{eff} от температуры T и скорости деформации $\dot{\epsilon}$, которая согласно (2.16) с точностью до постоянной τ_ϵ задает градиент скорости, определяемый для ультратонких слоев как V/h . Указанная зависимость представлена в виде трехмерной диаграммы на рис. 3.1, где

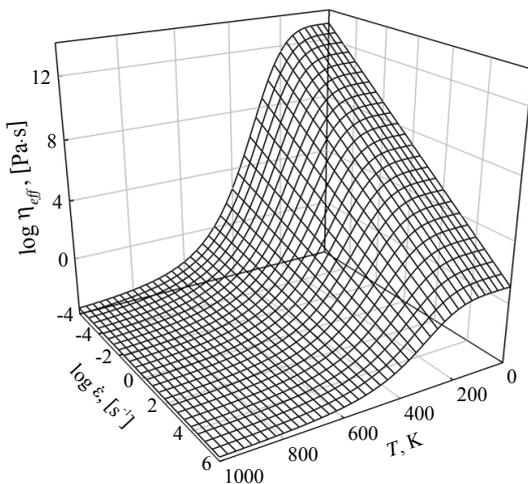


Рис. 3.1. Зависимость логарифма эффективной вязкости η_{eff} (3.1) эйкозана $C_{20}H_{42}$ от логарифма скорости деформации $\dot{\epsilon}$ и температуры T при параметрах $T_k = 353$ К, $\beta = 4,09$ [209].

шаг сетки по температуре равен 25 К, а $\log \dot{\epsilon}$ изменяется с шагом 0,5. Из приведенной диаграммы следует, что вязкость η_{eff} уменьшается с ростом температуры и скорости деформации $\dot{\epsilon}$. При повышении температуры зависимость от $\dot{\epsilon}$ ослабляется, поскольку значение параметра n согласно (3.2) с ростом T стремится к нулю, а при $n = 0$ вязкость (3.1) является ньютоновской. Отметим, что нами ранее исследовалось влияние различных температурных зависимостей вязкости смазочного материала в рамках реологической модели граничного трения [228], однако несомненное до-

стоинство выражения (3.1) состоит в том, что оно одновременно учитывает зависимость вязкости как от температуры T , так и от градиента скорости, который запишется как $\dot{\epsilon} = V/h$. Исследование влияния формы молекул на режим граничного трения проводилось и в ряде работ других авторов, к примеру [229–232].

3.2. Влияние температурной зависимости вязкости на трибологическую систему

3.2.1. Стационарная сила трения

При использовании вместо (2.28) выражения (3.1) сила трения F (2.30) запишется в виде

$$F = \left[a\varphi^2\tau_\varepsilon + \operatorname{sgn}(V) 10^{10,9n-3,8} \left(\frac{|V|}{h} \right)^{-n} \right] \frac{AV}{h}. \quad (3.4)$$

Рассмотрим в этом подразделе зависимость силы трения (3.4) от скорости сдвига V и температуры T в стационарном случае, а также особенности кинетики системы в случае фазового перехода первого рода, описываемого с помощью потенциала (2.46) при параметрах рис. 2.19. Такие зависимости показаны на рис. 3.2. Поскольку целью данного исследования является описание зависимости вязко-

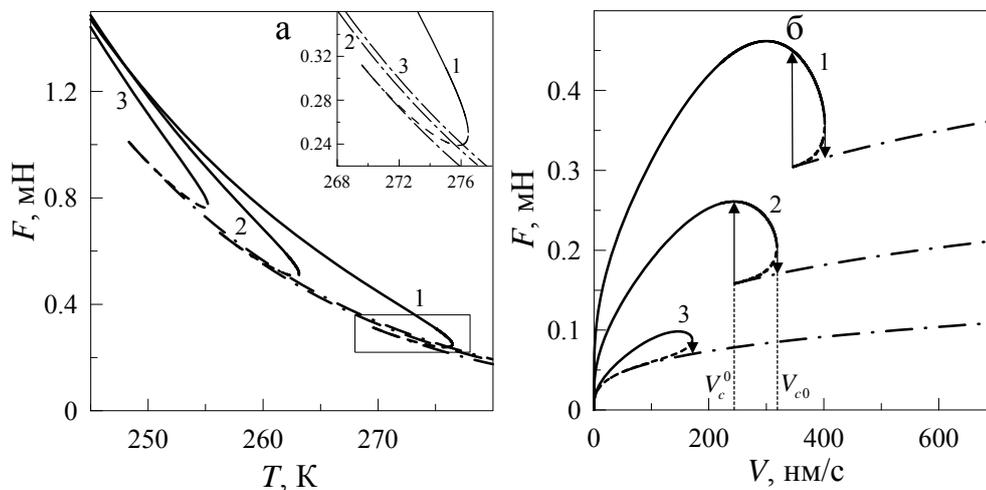


Рис. 3.2. Зависимости силы трения F (3.4) от температуры T и скорости сдвига V при параметрах рис. 2.19, рис. 3.1 и $A = 3 \cdot 10^{-9}$ м²: (а) кривые 1–3 отвечают постоянным значениям скорости сдвига $V = 350, 450, 500$ нм/с; (б) кривые 1–3 соответствуют фиксированным значениям температуры смазки $T = 270, 280, 292$ К.

сти η_{eff} от температуры T и градиента скорости $\dot{\varepsilon} = V/h$ (3.1) в случае фазового перехода первого рода, задаваемого несимметричным потенциалом (2.46), полученные на рис. 3.2 результаты следует описывать в сравнении с приведенными на рис. 2.22, который был построен при тех же параметрах, что и рис. 3.2, однако

с использованием зависимости для вязкости (2.28). На рис. 2.22 и рис. 3.2 наблюдается гистерезисное поведение, поскольку рассматривается модель фазовых переходов первого рода. Однако, на рис. 3.2 прослеживается зависимость силы трения от температуры за счет уменьшения вязкости, чего не было на рис. 2.22, на котором уменьшение силы трения с ростом температуры наблюдалось только за счет уменьшения стационарного значения параметра порядка согласно выражению (2.48). Опишем подробно наблюдаемые различия.

Рис. 3.2а (на котором температуры фазового перехода T_{c0} и T_{c0} стрелками не показаны, чтобы не загромождать рисунок) показывает уменьшение силы трения (3.4) с ростом температуры T , что происходит за счет уменьшения модуля сдвига μ (2.6), задающего упругую компоненту силы F (3.4), а также за счет уменьшения вязкости η_{eff} (3.1), которая определяет вязкую компоненту силы трения. После плавления смазки при температуре $T > T_{c0}$ (2.50) упругая компонента силы F становится нулевой, после чего сила трения продолжает уменьшаться за счет дальнейшего уменьшения эффективной вязкости (3.1). На рис. 2.22а после плавления $F(T) = \text{const}$, поскольку вязкая компонента F на рис. 2.22 зависит только от скорости сдвига V , а все кривые на рис. 2.22а построены при фиксированной скорости сдвига. Зависимость $F(T)$, приведенная на рис. 3.2б, демонстрирует более резкое снижение силы трения с ростом температуры по сравнению с результатами, показанными на рис. 2.22, поскольку здесь с ростом температуры уменьшается не только упругая, а также и вязкая компонента силы трения F . В рамках модели [45, 53], в которой также не учитывается температурная зависимость вязкости, сила трения F после плавления продолжает уменьшение с ростом температуры, как и на рис. 3.2а, однако за счет дальнейшего уменьшения модуля сдвига, который принимает ненулевое значение в обоих фазах смазочного материала. На вставке к рис. 3.2а показана его увеличенная часть, выделенная прямоугольником на основном рисунке. На ней видно, что после плавления для всех значений скоростей зависимости $F(T)$ не совпадают — при увеличении скорости сила трения возрастает. Это может происходить только за счет роста вязких напряжений σ_v (2.27), при увеличении мно-

жителя $\dot{\epsilon} = V/h$, поскольку упругая компонента F после плавления равна нулю, а вязкость η_{eff} (3.1) с ростом скорости $V = h\dot{\epsilon}$ уменьшается (см. рис. 3.1).

Согласно рис. 3.2б сперва при повышении скорости сила трения (3.4) растет за счет увеличения вязких σ_v и упругих σ_{el} напряжений. Упругие напряжения при малых V увеличиваются вследствие возрастания упругой компоненты деформации (2.16). Однако, с ростом скорости V существенно уменьшается модуль сдвига μ (2.6), что приводит к уменьшению упругой составляющей F . Существует критическая скорость, при превышении которой смазка твердоподобна, однако полная сила трения начинает уменьшаться. Отметим, что наличие максимума на зависимости $F(V)$ при малых скоростях скольжения V в режиме граничной смазки экспериментально наблюдали Д. М. Толстой и Р. Л. Каплан [193, 233]. С дальнейшим повышением скорости при $V > V_{c0}$ (2.51) смазка плавится. Если увеличивать скорость V после плавления, сила трения F продолжает свой рост за счет вязкой компоненты. Затвердевает смазка со скачкообразным увеличением F при скорости $V < V_c^0$ (2.25). На рис. 2.22б после плавления все кривые совпадают, поскольку не учитывается зависимость вязкой компоненты F от температуры. Здесь же рассматривается более реалистичная ситуация, в которой повышение температуры всегда приводит к снижению силы трения. Кривая 3 на рис. 3.2б отличается от других: ее сплошной (устойчивое значение F до плавления) и штриховой (неустойчивое значение F) участки вместе представляют замкнутую линию. В такой ситуации после плавления (стрелка вниз) $F(V)$ всегда описывается зависимостью, показанной штрихпунктиром, поскольку смазка не может затвердеть при понижении скорости V из-за наличия потенциального барьера свободной энергии (кривая 2 на рис. 2.19) даже при нулевой скорости сдвига $V = 0$. Аналогичная ситуация наблюдается на рис. 2.7 для кривых под номером 4.

3.2.2. Кинетика трибологической системы и прерывистый режим

Прежде чем рассматривать кинетику трибологической системы, приведем в графическом виде (рис. 3.3) зависимость $n(T)$ (3.2). Параметр n оказывает су-

щественное влияние на режим трения, устанавливающийся в трибологической системе, показанной на рис. 1.21. Ранее для моделирования нами использовалось значение $n = 2/3$ (см. раздел 2 диссертации), найденное экспериментально [134]. Как следует из рисунка 3.3, для различных алканов данное значение

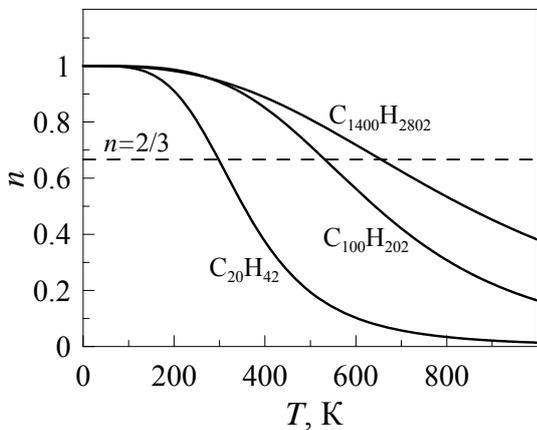


Рис. 3.3. Зависимость параметра n (3.2) от температуры T для трех типов смазок. Значения T_k и β взяты из работы [209]: $C_{20}H_{42}$ (353 К, 4,09); $C_{100}H_{202}$ (642 К, 3,68); $C_{1400}H_{2802}$ (840 К, 2,79).

реализуется при разных температурах T . Отметим, что с ростом длины молекулы C_nH_{2n+2} увеличивается как вязкость η_{eff} (3.1), так и температура плавления. Например, эйкозан $C_{20}H_{42}$, для которого приведена зависимость на рис. 3.1, плавится при нормальных условиях при температуре $36,4^\circ\text{C}$, в то время как температура плавления гектана $C_{100}H_{202}$ составляет $115,2^\circ\text{C}$. Для ультратонких слоев веществ, ограниченных твердыми поверхностями, эти температуры могут сильно отличаться, поскольку зависят от давления, приложенного к поверхностям, от их структуры, и т.д. Это

указывает на то, что при рассмотрении конкретного полимера необходимо изменять константы разложения в потенциале (2.46), правильный выбор которых требует проведения дополнительных экспериментов. Для исследования кинетики трибологической системы, показанной на рис. 1.21, будем численно решать систему дифференциальных уравнений (2.31), (2.55), с учетом определений, введенных в этом разделе диссертации. Полученные в результате решения указанных уравнений зависимости показаны на рис. 3.4. При выбранной температуре T в состоянии покоя ($\varepsilon_{el} = 0$) смазка твердоподобна, поэтому параметр порядка φ в начале движения принимает ненулевые значения, как это видно на вставке к рис. 3.4г. В начальный момент времени $t = 0$ свободный конец пружины начинает равномерное движение со скоростью $V_0 = 0,6$ мкм/с. При этом возрастает сила трения (3.4), упругая компонента напряжений σ_{el} (2.5) и растяжение пружины ΔX (2.32). При выполнении условия $V > V_{c0}$ (2.51) происходит плав-

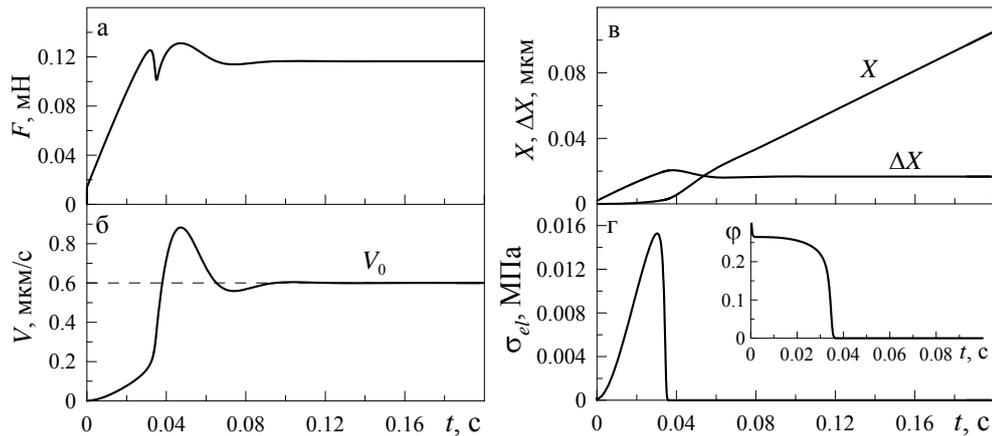


Рис. 3.4. Зависимости силы трения F (3.4), скорости сдвига верхней трущейся поверхности V , ее координаты X , длины растяжения пружины ΔX , упругих сдвиговых напряжений σ_{el} и параметра порядка φ от времени t при параметрах рис. 3.2 и $M = 0,4$ кг, $K = 7000$ Н/м, $\delta = 100$ (Па·с) $^{-1}$, $T = 290$ К, $V_0 = 0,6$ мкм/с.

ление. При этом напряжения σ_{el} и параметр порядка φ , показанные на рис. 3.4г, принимают нулевые значения, после чего наступает момент, когда блок начинает движение со скоростью $V > V_0$, поэтому пружина сжимается, а натяжение ΔX уменьшается. За счет этого некоторое время после плавления реализуется режим затухающих колебаний, вплоть до установления стационарного скольжения блока со скоростью $V = V_0 = 0,6$ мкм/с. Скорость V_0 намного больше критической V_c^0 (2.25), поэтому смазка остается жидкоподобной, обеспечивая тем самым постоянное значение вязкой силы трения F . Поскольку при стационарном движении поддерживается ненулевое значение силы трения, растяжение пружины не релаксирует до нуля. Оно может быть найдено из уравнения (2.31), которое в стационарном случае приводит к условию (2.39). В режиме стационарного скольжения зависимость координаты от времени приобретает линейный вид, поскольку блок движется с постоянной скоростью $V = V_0$. Отметим, что продолжительные затухающие колебания до установления стационарного скольжения обсуждались ранее в рамках синергетического представления процесса плавления граничной смазки [20, 162].

На рис. 3.4 приведен режим, в котором с течением времени устанавливается стационарное движение трущегося блока с постоянной скоростью. Однако, как это показано в разделе 2 диссертации, в режиме граничного трения в широком

диапазоне параметров реализуется прерывистое движение, когда относительная скорость трущихся поверхностей и сила трения периодически изменяются во времени (см. рис. 2.9). Такой режим показан на рис. 3.5, который представляет те же зависимости, что и на рис. 2.6, только при меньших значениях температуры смазки T и скорости сдвига свободного конца пружины V_0 . На начальном этапе

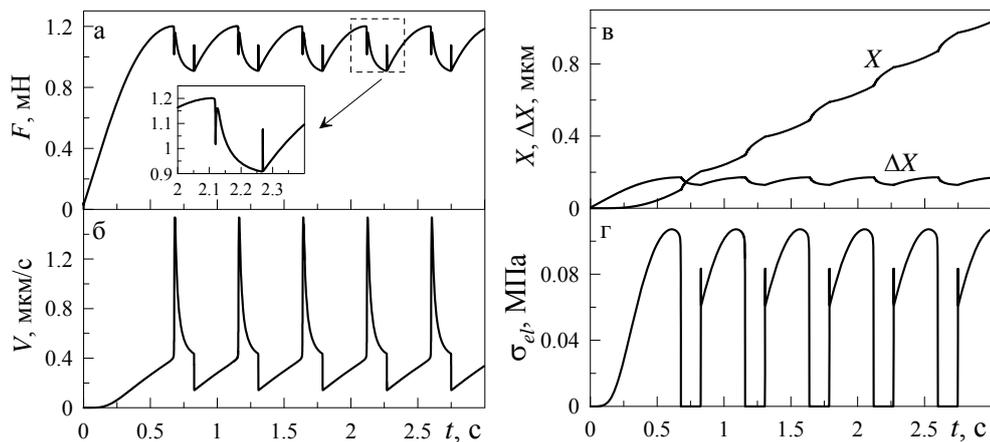


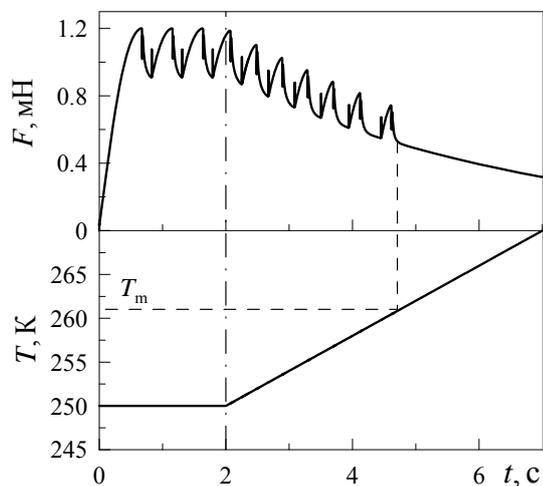
Рис. 3.5. Кинетические зависимости исследуемых величин при параметрах рис. 3.4, температуре $T = 250$ К и скорости сдвига $V_0 = 400$ нм/с.

движения поведение системы качественно совпадает с поведением, показанным на рис. 3.4. Однако, здесь плавление происходит при гораздо бóльшем значении натяжения пружины ΔX . За счет этого после плавления движущийся блок приобретает по сравнению с рис. 3.4 намного бóльшую скорость V , которая многократно превышает скорость движения свободного конца пружины V_0 . Пружина при этом сжимается, а натяжение ΔX уменьшается. В рассматриваемом случае при сжатии пружины в режиме скольжения верхний блок существенно теряет скорость, и когда наступает момент $V < V_c^0$, смазка затвердевает. После этого за счет увеличения скорости V выше значения V_{c0} в режиме сухого трения смазочный материал плавится, что приводит к прерывистому режиму движения. На зависимостях силы трения от времени, приведенных на рис. 3.4 и рис. 3.5, после плавления и последующего резкого уменьшения силы трения реализуется максимум $F(t)$, причины которого подробно рассмотрены в разделе 2 диссертации при описании рис. 2.10. Однако, в рассматриваемом в данном разделе случае, поскольку вязкость смазки η_{eff} является функцией температуры T , возмож-

но более сложное динамическое поведение трибологической системы, например, при определенном соотношении между параметрами возможно установление реверсивного режима скольжения [36], в котором в прерывистом режиме скорость трущегося блока периодически изменяет знак на противоположный [12].

3.2.3. Влияние температуры и скорости

Для выяснения особенностей влияния температуры смазки T на режимы функционирования трибологической системы, показанной на рис. 1.21, на рис. 3.6 приведена зависимость силы трения F от времени t при постепенном



увеличении температуры T согласно правилу

$$T \text{ (K)} = \begin{cases} 250, & t < 2 \text{ с}, \\ 242 + 4t, & t \geq 2 \text{ с}. \end{cases} \quad (3.5)$$

Рис. 3.6. Зависимость силы трения F от времени t при параметрах рис. 3.5 и повышении температуры T согласно зависимости (3.5), графически показанной на нижней панели рисунка.

На начальном этапе температура не изменяется, поэтому устанавливается стационарный режим прерывистого движения с пилообразной зависимостью $F(t)$. Этот режим более подробно показан на рис. 3.5, поскольку он построен при тех же параметрах модели. Далее мы начинаем линейно увеличивать температуру ("нагревать" смазку), что

приводит к уменьшению эффективной вязкости (3.1) (см. рис. 3.1) и соответствующему уменьшению силы трения F . На рисунке показана температура T_m , при превышении которой происходит полное плавление смазки и установление режима стационарного скольжения. Температура T_m отличается от значения T_{c0} (2.50), поскольку здесь рассматривается более сложный динамический случай, и на значение T_m оказывают существенное влияние такие параметры, как жесткость пружины K , масса блока M , и многие другие [35]. Стоит отметить, что на рис. 3.6 рост температуры смазочного материала T приводит к изменению частоты фазовых переходов, что показано ранее

на рис. 2.12. Однако, по сравнению с рис. 2.12, в предлагаемом рассмотрении с ростом температуры в прерывистом режиме существенно уменьшается кинетическое значение силы трения (минимальное значение F за период), что не было показано ранее. Здесь этот эффект вызван тем, что учитывается уменьшение эффективной вязкости η_{eff} (3.1) смазки с ростом ее температуры T . Подобное поведение следует ожидать и в реальных экспериментах по граничному трению, поскольку вязкость всегда зависит от температуры.

На рис. 3.7 показана зависимость силы трения от времени с последовательным увеличением скорости движения свободного конца пружины V_0 .

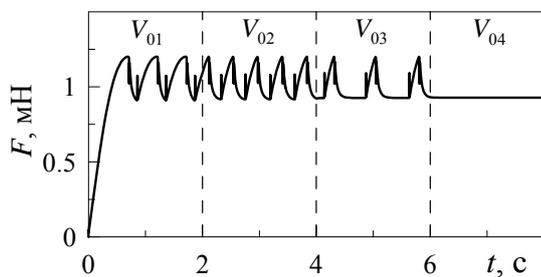


Рис. 3.7. Зависимость силы трения F (3.4) от времени t при параметрах рис. 3.6, температуре $T = 250$ К и скоростях свободного конца пружины $V_{01-04} = 395, 450, 485, 490$ нм/с.

Из рисунка следует, что с повышением скорости V_0 в прерывистом режиме уменьшается время, необходимое для плавления смазочного материала, что выражается в увеличении угла наклона зависимости $F(t)$ к оси абсцисс.

Другими словами, с увеличением V_0 в системе быстрее возникают упругие напряжения, необходимые для плавления смазочного материала. Сперва это приводит к увеличению частоты фазовых переходов плавление/затвердевание.

Однако, одновременно с увеличением скорости сдвига на зависимости $F(t)$ в моменты скольжения появляются длинные кинетические участки $F = \text{const}$, длина которых увеличивается с ростом скорости свободного конца пружины V_0 . В итоге это приводит к уменьшению частоты фазовых переходов. Описанное поведение наблюдается во многих экспериментах и теоретических моделях [12, 234]. При скорости $V_0 = V_{04}$ смазка плавится полностью, и устанавливается кинетический режим скольжения с постоянной силой трения. Поскольку зависимости на рис. 3.7 построены при фиксированной температуре T , они похожи на аналогичные зависимости, приведенные на рис. 2.11, с тем отличием, что на рис. 3.7 с ростом скорости сдвига частота фазовых переходов всегда увеличивается.

Стоит отметить, что в работе [32] проведено исследование трибологических

систем, показанных схематически на рис. 1.21 и рис. 2.13 в случае фазового перехода второго рода, задаваемого выражением (2.69) при вязкости η_{eff} (3.1). Полученные при таком исследовании результаты не имеют существенных качественных отличий по сравнению с приведенными ранее в настоящей диссертационной работе, поэтому здесь их не приводим, а ограничиваемся только ссылкой на указанную работу.

3.3. Эффекты памяти при фазовом переходе второго рода

В подразделе 1.1.7 литературного обзора рассмотрены эффекты памяти, имеющие место в трибологических системах, работающих в режиме граничного трения. Эти эффекты состоят в том, что при остановке свободного конца пружины в трибологической системе, показанной на рис. 1.21, и последующего возобновления движения режим трения зависит от длительности остановки t_s . Это связано с тем, что в режиме граничной смазки времена релаксации величин на несколько порядков больше, чем аналогичные времена для объемных смазок. Указанный факт приводит к тому, что за время остановки упругие напряжения не успевают релаксировать к нулевому значению даже в жидкоподобной структуре смазочного материала, поэтому после возобновления движения реализуется переходной режим, зависящий от того, насколько релаксировали напряжения, а это, в свою очередь, зависит от продолжительности остановки. Также возможны случаи, в которых напряжения практически не релаксируют за время остановки, что приводит к тому, что при возобновлении движения переходной режим отсутствует, а продолжается существующий до остановки режим трения. В данном подразделе диссертационной работы мы опишем теоретически такие эксперименты, что становится возможным при учете универсальной зависимости вязкости типа (3.1).

Причиной указанного поведения в модели фазового перехода первого рода может быть наличие на зависимости потенциала $\Phi(\varphi)$ (2.46) потенциально барьера, поэтому в данном рассмотрении остановимся на описании эффектов памяти в рамках модели фазового перехода второго рода, чтобы показать, что причиной возникновения описываемого далее поведения является введенная в рассмотре-

ние зависимость эффективной вязкости η_{eff} от температуры T (3.1).

3.3.1. Статическая сила трения

В рамках модели фазового перехода второго рода будем использовать потенциал (2.69). Сила трения, как и ранее, определяется выражением (3.4), в котором в стационарном случае параметр порядка φ согласно (2.71) задается равенством

$$\varphi_0 = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{b} - \frac{a\varepsilon_{el}^2}{b}}. \quad (3.6)$$

Ранее на рис. 3.6 и рис. 3.7 нами приведены и описаны рассчитанные зависимости силы трения F (3.4) от скорости сдвига V и температуры T в случае фазового перехода первого рода, который задается потенциалом (2.46). Трехмерные зависимости упругой и вязкой компонент силы трения F (3.4) от температуры и скорости сдвига при реализации в системе фазового перехода второго рода представлены на рис. 3.8. Зависимость $F_{el}(T, V)$ на рис. 3.8а по внешнему виду похо-

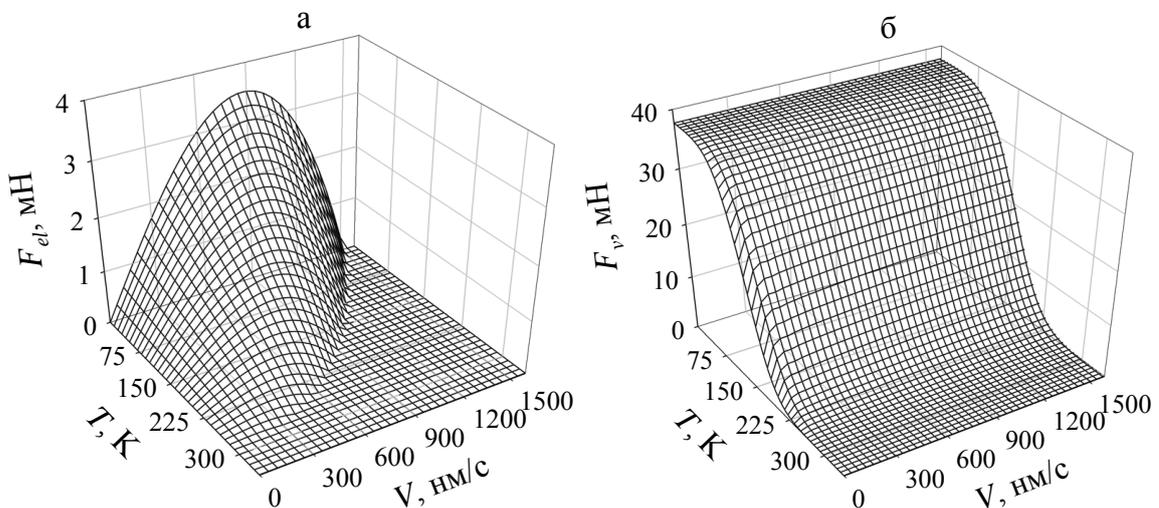


Рис. 3.8. Зависимости упругой составляющей силы трения $F_{el}(T, V)$ (а) и вязкой составляющей $F_v(T, V)$ (б) при параметрах рис. 2.32 и рис. 3.1.

жа на приведенную на рис. 2.32, поскольку построена при аналогичных значениях параметров модели, включая площадь контакта. Отличие между рисунками здесь в том, что на рис. 3.8а в жидкоподобном состоянии смазочного материала (когда стационарное значение параметра порядка $\varphi_0 = 0$) упругая сила трения $F_{el} = 0$. В

то время как на рис. 2.32 при скорости сдвига $V > 0$ сила трения F всегда отлична от нуля, поскольку F — полная сила трения, включающая вязкую компоненту. Стоит отметить, что согласно зависимостям, приведенным на рис. 3.8 при увеличении температуры T полная сила трения F всегда уменьшается.

На рис. 3.8б показана зависимость вязкой компоненты силы трения $F_v(T, V)$, которая задается вторым слагаемым в скобках в выражении (3.4). Вязкая компонента показана отдельно, поскольку это основное отличие по сравнению с описанной ранее ситуацией на рис. 2.32, к которому приводит зависимость эффективной вязкости η_{eff} (3.1). Из рисунка видно, что с ростом температуры смазочного материала вязкая сила трения существенно уменьшается. С ростом скорости такого уменьшения не происходит, поскольку здесь играют роль два фактора. С одной стороны, с увеличением скорости сдвига V уменьшается эффективная вязкость η_{eff} (3.1), зависимость которой показана на рис. 3.1, и сила трения F_v за счет этого должна уменьшаться. Но вязкие напряжения σ_v согласно формуле (2.27) задаются произведением эффективной вязкости η_{eff} и скорости сдвига V , поэтому с ростом скорости имеют также тенденцию и к увеличению.

По сравнению с рис. 2.32, где вязкость полагалась независимой от температуры, рис. 3.8б показывает довольно большие значения вязкой силы трения F_v при низких температурах. В частности, из рис. 3.8б следует, что при низких температурах смазочного материала вязкая сила трения имеет большие значения даже при близких к нулю скоростях сдвига. Отличие от нуля силы трения при приближении скорости сдвига к нулевому значению (остановка системы) говорит о наличии в системе статической силы трения, которая часто для рассматриваемых систем наблюдается экспериментально. Поэтому стоит провести более детальное изучение указанного эффекта появления статической силы трения при учете универсальной зависимости эффективной вязкости в виде (3.1).

На рис. 3.9а сплошными линиями показаны зависимости полной силы трения F (3.4) от логарифма относительной скорости сдвига трущихся поверхностей $\lg V$. Из соотношения (3.4) следует, что при выполнении условий $V \rightarrow 0, T \neq 0$ значение силы трения $F \rightarrow 0$. На рис. 3.9а показаны зависимо-

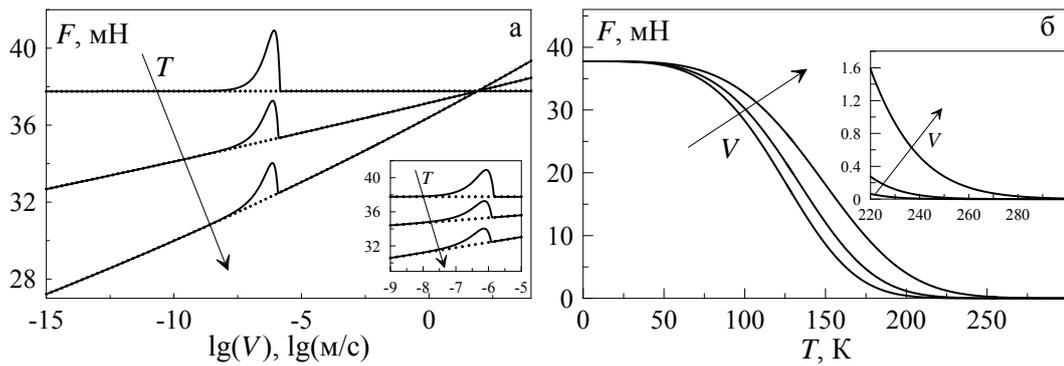


Рис. 3.9. Зависимости силы трения F (3.4) от температуры T и скорости сдвига V при параметрах рис. 3.8: (а) $T = 20, 90, 110$ К; (б) $V = 10^{-9}, 10^{-15}, 10^{-20}$ м/с. Увеличение температур и скоростей от кривой к кривой показано стрелками.

сти $F(V)$ при трех фиксированных значениях температуры T для широкого диапазона скоростей сдвига $V = 10^{-15} \div 10^4$ м/с. Вид кривых говорит о том, что при криотемпературах сила трения имеет существенно отличное от нуля значение при практически нулевых скоростях сдвига $V = 10^{-15}$ м/с. Описываемая ситуация аналогична наличию в системе сил статического трения [235], когда при $V = 0$ сила трения $F \neq 0$. Однако, в нашем случае согласно выражению (3.4) при $V = 0$ сила трения $F = 0$. Поэтому будем называть конечную силу трения $F \neq 0$ при $V \ll 1$ нм/с квазистатической [236]. Такая ситуация позволяет описать эффекты памяти, когда после длительной остановки трущихся поверхностей и последующего возобновления их движения продолжается реализация установившегося до этого режима трения, минуя начальный переходный режим. Эффект наблюдается за счет того, что во время остановки системы напряжения в смазочном слое не релаксируют, поскольку молекулы смазочного материала остаются плотно зажатыми между рельефами трущихся поверхностей в том состоянии, в котором они были до остановки. В диапазоне скоростей $V = 10^{-9} \div 10^{-5}$ м/с на всех кривых на рис. 3.9а просматриваются максимумы, как это хорошо видно на увеличенном фрагменте рисунка. Более подробно такое поведение представлено на трехмерном рис. 3.8, где меньшему значению температуры соответствует большее значение силы трения F . На рис. 3.9а для всех зависимостей пунктирной линией показана вязкая компонента силы трения F_v , как на рис. 3.8б. Видно, что при малых и больших скоростях сдвига вязкая компонента является определяющей.

Однако, упругая составляющая F_s вносит существенный вклад в полную силу трения в области актуальных скоростей сдвига $V = 10^{-9} \div 10^{-5}$ м/с, что видно на вставке к рис. 3.9а. И именно упругая компонента является причиной прерывистого режима движения в динамическом случае. Если рассмотреть вставку к рисунку более подробно, то можно сделать вывод, что при скоростях $V > 10^{-5}$ м/с ($V > V_{c0}$) смазка жидкоподобна и упругие напряжения $\sigma_{el} = 0$. При $V < 10^{-9}$ м/с вклад σ_{el} нивелируется, поскольку согласно (2.5) и (2.16) $\sigma_{el} \propto V$.

На рис. 3.9б представлена зависимость $F(T)$ при малых скоростях сдвига (направление увеличения скорости V показано на рисунке стрелкой). Из рисунка видно, что снижение скорости приводит к уменьшению силы трения, однако при нулевой температуре $T = 0$ сила трения F при любых скоростях $V < 1$ нм/с принимает приблизительно одно и то же фиксированное значение. Анализ выражения (3.4) позволяет установить следующую зависимость:

$$\lim_{V \rightarrow 0; T \rightarrow 0} F(V, T) = 10^{7,1} \text{ А}, \quad (3.7)$$

что при параметрах рис. 3.9 составляет $F \approx 37,768$ мН. Из указанного выше следует, что при сверхнизких температурах и скоростях сдвига зависимость $F(V, T)$ подобна δ -функции, которая в нуле принимает конечное значение, определяемое выражением (3.7), а в окрестности нулевых температур и скоростей $F(V, T) = 0$.

3.3.2. Скольжение после длительной остановки внешнего привода

В работах [12, 237–239] проводится экспериментальное изучение поведения системы, показанной на рис. 1.21, когда после установки стационарного режима движения внешний привод останавливается на фиксированное время, а затем движение продолжается снова. Установлено, что в зависимости от скорости движения, температуры смазки, а также приложенной внешней нагрузки возможна реализация различных режимов работы после остановки и последующего возобновления движения. Например, в [12] после остановки привода наблюдался переход от прерывистого режима (SS) к режиму скольжения (SF). В работе показано, что после остановки длительностью $t_s \sim 60$ с и последующем движении в

системе устанавливается прерывистый режим, причем первый пик на зависимости силы трения $F(t)$ (“*stiction spike*”) имеет бóльшую высоту, чем аналогичные пики в стационарном режиме [12, 237, 239]. При скорости сдвига выше критической V_c , необходимой для плавления, после включения внешнего привода наблюдался единственный пик, после чего система продолжает функционировать в SF режиме [237]. Выяснено, что высота этого пика зависит от времени остановки t_s [237, 239]. Подобное поведение получено и в рамках рассматриваемой модели [43], однако без учета температурной зависимости вязкости и квазистатической силы трения. В частности, в [43] показано, что после остановки внешнего привода в режиме SF системе необходимо время, чтобы смазка перешла в твердоподобное состояние, при переходе в которое реализуется пик на зависимости $\sigma_{el}(t)$, причем пик на зависимости $F(t)$ при этом отсутствует (см. рис. 2.8).

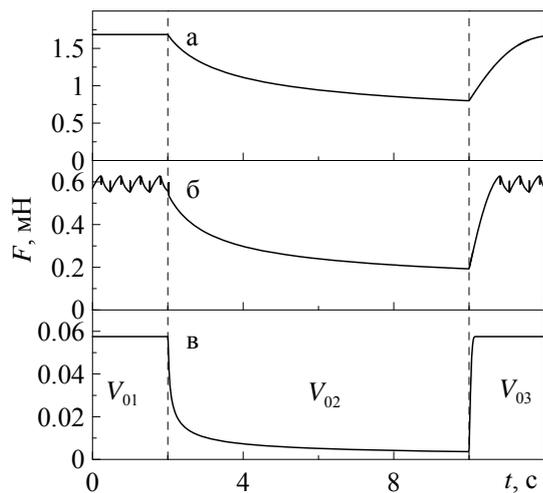


Рис. 3.10. Зависимость силы трения F от времени t при параметрах рис. 3.8 и $\delta = 100$ (Па·с)⁻¹, $M = 0,4$ кг, $K = 2000$ Н/м и $V_{01-03} = 400, 0, 400$ нм/с. Панели а – в рисунка соответствуют температурам $T_{1-3} = 240, 260, 300$ К.

На рис. 3.10 показана зависимость силы трения $F(t)$ (3.4) при различных значениях температуры T смазочного материала⁹. Здесь на начальном отрезке времени $t < 2$ с внешний привод движется со скоростью $V_0 = 400$ нм/с, последующие $t_s = 8$ с свободный конец пружины неподвижен, после чего приводится в движение с первоначальной скоростью $V_0 = 400$ нм/с. Зависимость $F(t)$ на рис. 3.10а построена при температуре $T_1 = 240$ К. В данном случае в системе устанавливается режим сухого трения DF со стационарным значением силы трения $F = \text{const}$. Через промежуток времени $t = 2$ с (после первой вертикальной штриховой линии) внешний привод останавливается, однако верхний трущийся

⁹Все зависимости на рис. 3.10 показаны с момента времени $t = 5$ с, который на рисунке показан как $t = 0$. Такое представление выбрано в связи с тем, что нас в данном случае интересует стационарный режим трения, устанавливающийся за указанный промежуток времени.

блок (см. рис. 1.21) продолжает движение за счет потенциальной энергии растянутой пружины. Со временем натяжение пружины ΔX уменьшается, при этом наблюдается релаксация силы трения F , а скорость блока V снижается, но остается ненулевой за счет растянутой пружины. Поскольку температура смазочного материала $T > 0$, как это указано выше, сила трения $F \rightarrow 0$ при $V \rightarrow 0$, однако скорость V релаксирует достаточно медленно. При этом времена t , на которых сила трения $F = 0$, превышают возможности экспериментального наблюдения, поскольку в зависимости от параметров системы они могут исчисляться годами. Однако, стоит понимать, что в рассматриваемом случае при $t \rightarrow \infty$ сила трения $F \rightarrow 0$. Таким образом, релаксация напряжений в зажатом при остановке смазочном слое все же происходит до нулевого значения, но медленность этого процесса позволяет наблюдать особенности *stop-start* экспериментов [12, 237, 239]. Другими словами, полученный нами результат предлагает механизм описания особенностей экспериментального поведения нанотрибологических систем, которое не укладывается в рамках классических представлений трибологической науки.

Рис. 3.10б построен при большем значении температуры смазки $T_2 = 260$ К. Здесь наблюдается стационарный прерывистый режим движения *stick-slip* [240]. После остановки внешнего привода смазочный слой затвердевает, поэтому сила трения F содержит вклады от вязких и упругих напряжений, которые медленно релаксируют, как и в случае, описанном выше. Однако, минимальное значение силы трения здесь меньше, чем на рис. 3.10а, поскольку рис. 3.10б построен при большем значении температуры смазки $T_2 > T_1$. После повторного включения внешнего привода в системе снова устанавливается *stick-slip* режим движения, как и до остановки движущего привода. Дальнейшее увеличение температуры до значения $T_3 = 300$ К (рис. 3.10в) приводит к установлению стационарного режима жидкостного трения SF . Здесь в начале движения при $t < 2$ с смазка жидкоподобна, поскольку $T_3 > T_{c0}$ (2.78), поэтому сила трения F имеет только вязкую составляющую. После остановки внешнего привода при $t > 2$ с сила трения уменьшается почти до нулевого значения, поскольку до

остановки пружина практически не была растянута, так как реализовался режим скольжения SF . После включения внешнего привода сила трения снова увеличивается до стационарного значения, соответствующего заданной скорости сдвига и температуре смазки. Отметим, что на рис. 3.10 в случаях, когда реализуется прерывистый и сухой режимы трения (панели а, б), все ситуации имеют общую черту: в начале движения смазка твердоподобна и, как это описано выше, при таких температурах реализуется квазистатическая сила трения F .

Из рис. 3.10 следует, что динамическая сила трения F после остановки движущего привода релаксирует к значению, которое уменьшается с ростом температуры смазочного материала T . Такое поведение легко понять, посмотрев на рис. 3.9б, который показывает величину силы трения при скоростях сдвига, близких к нулевому значению, как функцию термодинамической температуры T .

3.4. Эффекты памяти при фазовом переходе первого рода

В подразделе 3.3 диссертации рассмотрено влияние универсальной температурной зависимости вязкости η_{eff} (3.1) на кинетику трибологической системы. Показано, что при этом возможно теоретическое описание особенностей *stop-start* экспериментов и наблюдаемых в них эффектов памяти, связанных с медленной релаксацией напряжений во время остановки. К такой релаксации в рамках нашей модели приводит квазистатическая сила трения, которая появляется естественным образом при использовании выражения (3.1). В предыдущих разделах и подразделах диссертации нами рассмотрена модель фазовых переходов, в которой реализуются два устойчивых состояния, описываемых нулевым (жидкоподобная структура) либо ненулевым (твердоподобная структура) значением параметра порядка φ . Такая ситуация справедлива для систем, состоящих из квазисферических молекул типа ОМЦТС $C_8H_{24}O_4Si_4$, способных образовывать упорядоченные структуры [12]. Однако, часто в экспериментах по граничному трению используются цепные молекулы, для которых ситуация более сложная (см. подраздел 1.1.6 литературного обзора). Дело в том, что такие системы не способны образовывать упорядоченные структуры с дальним порядком, и при больших

трибологических давлениях за счет этого как твердоподобная, так и жидкоподобная структуры могут характеризоваться ненулевыми значениями параметра порядка φ . В свою очередь, это приведет к ненулевому значению упругой силы трения, которая согласно (2.30) и (2.5) при $V \neq 0$ принимает нулевые значения только когда параметр порядка $\varphi = 0$. Соответственно, следует ожидать, что в таком случае описание эффектов памяти и квазистатической силы трения становится возможным без привлечения температурной зависимости вязкости типа (3.1). Проведем в этом подразделе такое исследование.

3.4.1. Свободная энергия и тип фазового перехода

Запишем плотность свободной энергии для граничной смазки как разложение в ряд по степеням параметра порядка φ (ср. с (2.46))¹⁰

$$\Phi = -a\varphi + \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{b}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{c}{3}\varphi^3 + \frac{d}{4}\varphi^4, \quad (3.8)$$

где α, a, b, c, d — положительные постоянные. В разделе 2 диссертации параметр порядка φ принимает ненулевое значение, когда смазка имеет твердоподобную структуру, а в жидкоподобном состоянии $\varphi = 0$. Разложение (3.8) предполагает ситуацию, в которой твердоподобному состоянию, как и ранее, отвечает ненулевое значение параметра φ , а в жидкоподобная структура характеризуется также ненулевым φ , однако это значение значительно меньше величины, соответствующей твердоподобному состоянию. Такая ситуация рассматривалась нами ранее в рамках другой модели [49] и соответствует системам, в которых в качестве смазки используются сложные полимерные молекулы. В этом случае при больших нагрузках за счет сдавливания поверхностями трения смазка не может полностью расплавиться и обеспечить нулевое значение параметра порядка φ . Таким образом, происходит только частичное плавление, после которого параметр порядка имеет близкое к нулю ненулевое значение.

¹⁰Причина возникновения линейного слагаемого описана в конце подраздела 2.1.

Согласно выражению (3.8) упругие напряжения определяются как $\sigma_{el} = \partial\Phi/\partial\varepsilon_{el}$ и составляют (ср. с (2.5))

$$\sigma_{el} = b\varphi^2\varepsilon_{el} = \mu\varepsilon_{el}. \quad (3.9)$$

Проанализируем стационарные состояния, соответствующие потенциалу (3.8). Для этого сначала выразим значение температуры T из условия стационарности $\partial\Phi/\partial\varphi = 0$:

$$T(\varphi_0) = T_c + \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{a}{\varphi_0} - b\varepsilon_{el}^2 + c\varphi_0 - d\varphi_0^2 \right), \quad (3.10)$$

где φ_0 — стационарные значения параметра порядка, а $T(\varphi_0)$ — температура смазки, при которой эти стационарные значения реализуются.

Как и в предыдущем разделе диссертации, будем считать, что в состоянии покоя при $V = 0$ и $T = 0$ смазочный материал характеризуется максимальным безразмерным значением параметра порядка $\varphi_{\max} = 1$, который нормирован на максимально возможное значение модуляции плотности φ (см. рис. 2.2).

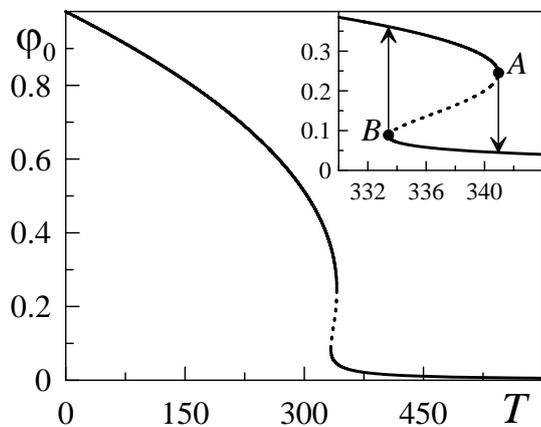


Рис. 3.11. Зависимость стационарных значений параметра порядка φ_0 от температуры T (3.10) при параметрах $\alpha = 1,2 \text{ Дж}\cdot\text{К}^{-1}/\text{м}^3$, $T_c = 290 \text{ К}$, $a = 4 \text{ Дж}/\text{м}^3$, $b = 2 \cdot 10^{10} \text{ Па}$, $c = 800 \text{ Дж}/\text{м}^3$, $d = 1500 \text{ Дж}/\text{м}^3$, $h = 10^{-9} \text{ м}$, $\tau_\varepsilon = 10^{-7} \text{ с}$ и скорости сдвига $V = 0 \text{ нм}/\text{с}$.

Уравнение (3.10) с учетом вышеуказанного приводит к условию

$$a + c - d + 2\alpha T_c = 0, \quad (3.11)$$

которое учитывается нами далее при выборе постоянных разложения (3.8). Зависимость (3.10) при фиксированных параметрах модели показана на рис. 3.11. Как можно видеть из рисунка, стационарное значение φ_0 с увеличением температуры T стремится к нулю, но никогда не достигает нулевого значения. Это происходит благодаря наличию первого слагаемого в разложении (3.8). Если понижать температуру, будет происходить увеличение параметра порядка φ_0 , и при нулевой температуре

он достигнет своего максимального значения $\varphi_{\max} = 1$. Но в промежуточном диапазоне температур $T_B < T < T_A$ (значения T_A и T_B соответствуют точкам A и B на рис. 3.11), который более подробно показан на вставке к рисунку, реализуются три стационарных значения параметра порядка (три решения уравнения (3.10)). При этом, например, при температуре $T = 336$ К два стационарных состояния устойчивы (сплошные линии на рисунке), поскольку соответствуют минимумам потенциала (3.8), а одно значение φ_0 соответствует максимуму энергии (3.8), поэтому отвечает неустойчивому состоянию (пунктирная линия). Такой вид потенциала соответствует фазовым переходам первого рода. Согласно рисунку, если постепенно повышать температуру T от нулевого значения, стационарное значение параметра порядка φ_0 монотонно уменьшается до температуры T_A , после чего осуществляется скачкообразное уменьшение φ_0 , как это показано стрелкой вниз на вставке к рисунку. При этом происходит плавление смазки по механизму фазового перехода первого рода между структурными состояниями смазочного материала, представляющими в данном случае неравновесные кинетические режимы трения [12]. После дальнейшего увеличения температуры значение φ_0 уменьшается, но, как это указано выше, никогда не достигает нулевого значения. Эта особенность, как это будет показано далее, позволяет теоретически описать ”эффекты памяти“, наблюдаемые экспериментально [12, 241].

В зависимости от параметров модели потенциал $\Phi(\varphi)$ (3.8) позволяет описывать как скачкообразные фазовые переходы первого рода, так и непрерывные переходы второго рода [49]. Найдем критерий, который будет определять тип перехода. Если функция (3.10), показанная на рис. 3.11, монотонна во всем диапазоне положительных температур, будет реализовываться непрерывный фазовый переход второго рода. В случае, когда на зависимости $\varphi_0(T)$ существует двузначный гистерезисный участок, как это показано на вставке к рис. 3.11, мы имеем фазовый переход первого рода. В точках A и B зависимость $\varphi_0(T)$ (3.10) имеет вертикальные касательные, то есть выполняется условие $\partial T / \partial \varphi_0 = 0$, что приводит к выражению

$$\varphi_0^3 - \frac{c}{2d}\varphi_0^2 + \frac{a}{2d} = 0. \quad (3.12)$$

Корни уравнения (3.12) задают абсциссы точек A и B на зависимости $\varphi_0(T)$, показанной на рис. 3.11. Итак, фазовый переход первого рода будет наблюдаться только тогда, когда уравнение (3.12) имеет два несовпадающих действительных положительных корня. Кубическому уравнению (3.12) соответствует дискриминант [217]

$$\Delta = \frac{a}{4d^2} \left(\frac{c^3}{d^2} - 27a \right), \quad (3.13)$$

знак которого задает тип решений уравнения (3.12). Поскольку a , c и d — положительные постоянные, для анализа удобно ввести новую константу

$$\tilde{g} = c^3 - 27ad^2. \quad (3.14)$$

Если $\tilde{g} > 0$, уравнение (3.12) имеет три различных действительных корня, причем два положительных и один отрицательный, что соответствует фазовому переходу первого рода. Заметим, что отрицательные значения параметра φ не имеют физического смысла, поэтому дальше не рассматриваются. При $\tilde{g} = 0$ имеем три действительных корня — два кратные положительные и один отрицательный, то есть в системе происходит фазовый переход второго рода, поскольку точки A и B на зависимости $\varphi_0(T)$ совпадают. И в последнем случае при $\tilde{g} < 0$ имеем один действительный отрицательный и два комплексно-сопряженных корня с положительной действительной частью, что также соответствует фазовому переходу второго рода.

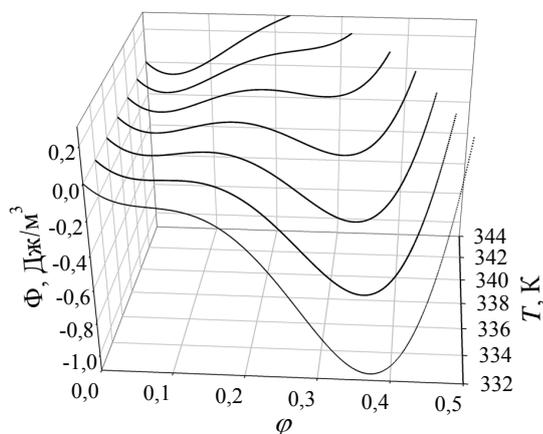


Рис. 3.12. Трехмерная зависимость плотности свободной энергии Φ (3.8) от параметра порядка φ и температуры T при параметрах рис. 3.11.

В дальнейшем исследовании мы сосредоточим внимание на фазовом превращении первого рода, то есть будет рассматривать ситуацию с $\tilde{g} > 0$. А именно, будем использовать набор параметров рис. 3.11, при которых $\tilde{g} = 2,69 \cdot 10^8$ Дж³/м⁹.

На рис. 3.12 представлена трехмерная зависимость потенциала (3.8) от параметра порядка φ и температуры смазки T . На рисунке показан диапазон температур, в котором в мас-

штабах рисунка можно четко рассмотреть три принципиально различных случая. При низких температурах потенциал характеризуется единственным минимумом, соответствующим твердоподобной структуре смазки. С повышением температуры реализуется ситуация, когда сосуществуют два минимума, разделенные максимумом. В зависимости от начальных условий стационарное значение φ_0 будет задаваться одним из них. С дальнейшим ростом температуры зависимость $\Phi(\varphi)$ снова имеет единственный минимум, но стационарное значение φ_0 , соответствующее этому минимуму, значительно меньше, чем для более низких температур. Такой вид потенциала соответствует частичному плавлению, после которого устанавливается стационарный режим, которому соответствует ненулевой минимум свободной энергии. Согласно формуле (3.9), в таком случае во время движения поверхностей трения в смазке всегда существуют ненулевые упругие напряжения σ_{el} , медленно релаксирующие после остановки системы. Описанная ситуация неоднократно наблюдалась в экспериментах [12, 237] и компьютерном моделировании [239].

Воспользуемся зависимостью между скоростью сдвига и упругой компонентой деформации (2.16), возникающей в смазке. С учетом (2.16) выражение (3.10) можно переписать в виде

$$T(\varphi_0) = T_c + \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{a}{\varphi_0} - b \left(\frac{V\tau_\varepsilon}{h} \right)^2 + c\varphi_0 - d\varphi_0^2 \right). \quad (3.15)$$

Если в выражение (3.15) подставить корни уравнения (3.12), мы получим критические температуры. Причем критическая температура затвердевания смазки T_c^0 (соответствует точке B на рис. 3.11) определяется при подстановке меньшего по величине положительного корня $\varphi_{0,1}$ уравнения (3.12), а критическая температура плавления T_{c0} (соответствует точке A на рис. 3.11) — при подстановке большего положительного корня $\varphi_{0,2}$.

Анализируя выражение (3.15), можно показать, что плавление смазки происходит не только при превышении температурой критического значения, а также когда скорость сдвига V превышает определенное критическое значение V_{c0} . Затвердевает смазка, когда скорость V становится меньше значения V_c^0 . Величины

этих критических скоростей в соответствии с (3.15) определяются выражением

$$V(\varphi_0) = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{a}{b\varphi_0} + \frac{2\alpha(T_c - T) + c\varphi_0 - d\varphi_0^2}{b}}, \quad (3.16)$$

где φ_0 по-прежнему являются корнями уравнения (3.12).

На рис. 3.13а показана зависимость критических скоростей плавления V_{c0} и затвердевания V_c^0 , рассчитанные по формулам (3.16) и (3.12), от температуры смазки T (ср. с рис. 2.6). В случае, когда осуществляется относительное дви-

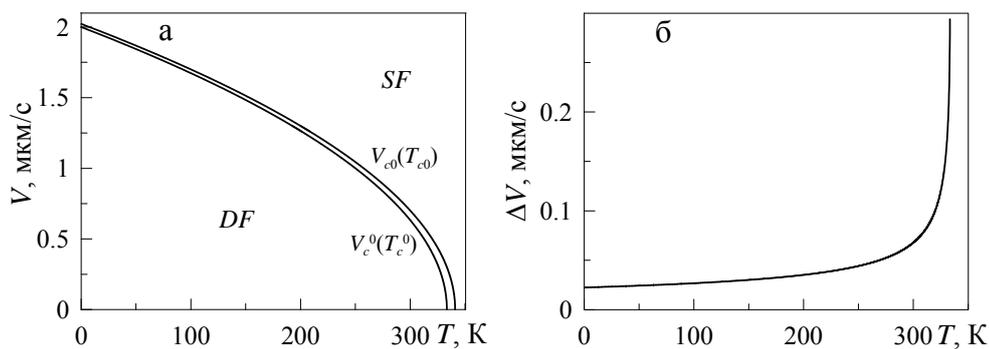


Рис. 3.13. (а) фазовая диаграмма с областями жидкостного (SF) и сухого (DF) трения при параметрах рис. 3.11; (б) ширина гистерезиса по скорости ΔV как функция температуры T .

жение поверхностей трения с фиксированной скоростью при $V > V_{c0}$, смазочный материал находится в жидкоподобном состоянии, и в трибологической системе реализуется режим жидкостного трения SF . В области скоростей сдвига $V < V_c^0$ смазка имеет твердоподобную структуру. Между кривыми на рис. 3.13 потенциал $\Phi(\varphi)$ (3.8) имеет два минимума, разделенные максимумом (см. рис. 3.12), поэтому состояние смазки в этой области является неопределенным и зависит от начальных условий. Расстояние между кривыми на рис. 3.13а по горизонтали при постоянной скорости $V = \text{const}$ является шириной гистерезиса $\Delta T = T_{c0} - T_c^0$, которая при выбранных параметрах модели является постоянной величиной и в обозначениях рис. 3.11 составляет $\Delta T = T_A - T_B \approx 7,53$ К. Расстояние между кривыми, показанными на рис. 3.13а по вертикали ($T = \text{const}$) является шириной гистерезиса $\Delta V = V_{c0} - V_c^0$, которая зависит от значения температуры T . Указанная зависимость показана на рис. 3.13б.

3.4.2. Сила трения

На рис. 3.14 показаны зависимости силы трения F (2.30) от температуры T и скорости сдвига V , соответствующие потенциалу (3.8) и вязкости (2.28). Штриховые кривые на рисунке соответствуют жидкоподобной структуре смазки,

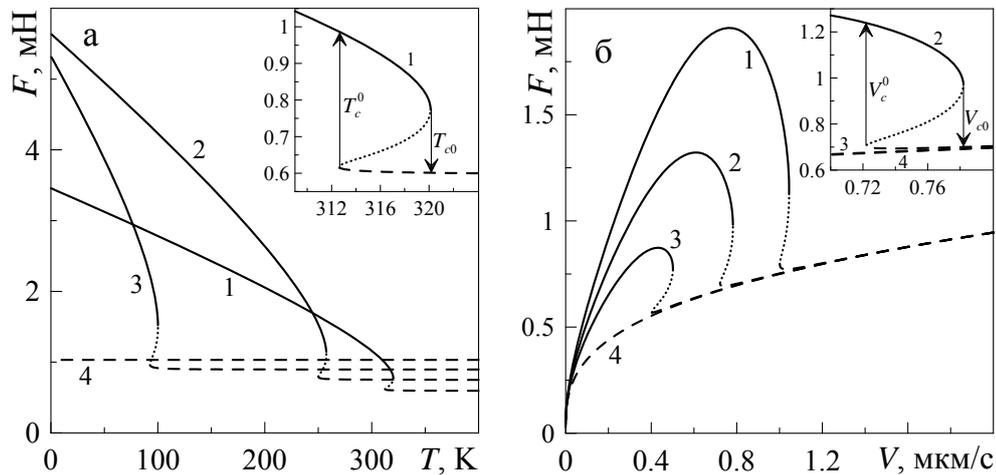


Рис. 3.14. Зависимости силы трения F (2.30) от температуры T и скорости сдвига V при параметрах рис. 3.13 и $\gamma = -2/3$, $A = 3 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$, $k = 2,5 \cdot 10^4 \text{ Па} \cdot \text{с}^{1/3}$: (а) кривые 1–4 соответствуют постоянным скоростям сдвига $V = 500, 1000, 1700, 2600 \text{ нм/с}$; (б) кривые 1–4 соответствуют фиксированным значениям температуры $T = 250, 290, 320, 400 \text{ К}$.

сплошные — твердоподобной. Пунктирные участки отвечают неустойчивым стационарным состояниям (максимумам потенциала (3.8)). Зависимости силы трения F от температуры T и скорости V во многом качественно повторяют результаты, показанные на рис. 2.7 и рис. 2.22, которые показывают аналогичные зависимости для фазового перехода первого рода, отвечающие вязкости (2.28) и потенциалам (2.4), (2.46), соответственно. Однако, в рассматриваемом случае реализуется одно важное отличие, описание которого и является целью проводимого исследования. Дело в том, что в выражениях для потенциалов (2.4), (2.46) отсутствует линейное слагаемое, присутствующее в разложении (3.8). Как это описано выше, наличие линейного слагаемого приводит к появлению в смазочном материале ненулевых упругих напряжений σ_{el} после плавления. А поскольку с ростом температуры T , как это видно из рис. 3.11, уменьшается стационарное значение параметра порядка φ_0 , с ним же согласно выражению (3.9) уменьшаются и упругие напряжения σ_{el} . На зависимостях $F(T)$, показанных на рис. 3.14а, это приво-

дит к уменьшению силы трения F после плавления, что хорошо видно на вставке к рисунку (на рис. 2.7 и рис. 2.22 после плавления $F(T) = \text{const}$). На рис. 3.14б указанный факт приводит к тому, что после плавления, как это видно на вставке к рисунку¹¹, зависимости $F(V)$ для различных значений температур не совпадают, как это было на рис. 2.7 и рис. 2.22. Таким образом, использование потенциала (3.8) соответствует более реалистичному случаю. Аналогичное поведение, но более выраженное, наблюдается на рис. 3.2, при использовании вязкости η_{eff} (3.1). Другими словами, описанные эффекты можно учитывать как при использовании зависимости вязкости от температуры (3.1), так и модифицированного потенциала (3.8).

Для более детального анализа на рис. 3.15 показаны зависимости силы

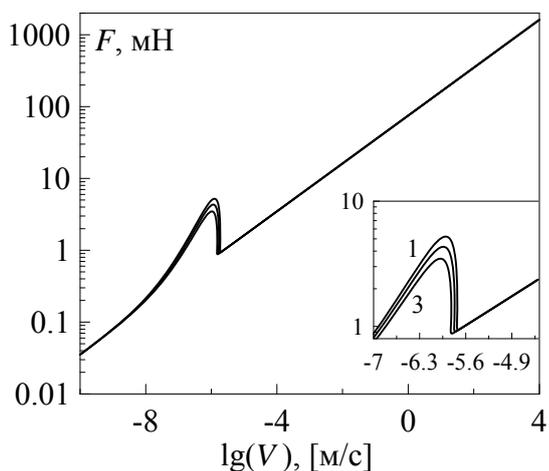


Рис. 3.15. Зависимости силы F (2.30) от скорости сдвига V при параметрах рис. 3.14, кривые 1–3 соответствуют температурам $T = 50, 100, 150$ К.

трения F (2.30) от скорости сдвига V в двойных логарифмических координатах в широком диапазоне скоростей $V = 10^{-10} \div 10^4$ м/с. При сверхнизких скоростях сдвига $V < 10^{-9}$ м/с сила трения генерируется только за счет вязких напряжений, поскольку σ_v пропорциональны $V^{-1/3}$, а упругие напряжения σ_{el} пропорциональны V , которая при этом мала, поэтому вклад последних незначительный. В данном случае сила трения $F \rightarrow 0$, но нулевые значения она приобретает при еще меньших скоростях сдвига ($V \rightarrow 0$). На рис. 3.14б данная

зависимость представлена ”вертикальным“ участком на кривых $F(V)$ при $V \approx 0$. Описанная ситуация соответствует наличию в системе статического трения, когда при $V = 0$ сила трения $F \neq 0$, хотя в нашей модели согласно (2.30) при $V = 0$ сила трения тождественно равна нулю, поэтому мы называем ненулевую силу трения при таких скоростях квазистатической, как и на рис. 3.9. Повышение ско-

¹¹На рис. 3.14а на вставке показана только кривая 1, на вставке к рис. 3.14б показаны элементы всех кривых, находящиеся в области вставки.

рости V приводит к увеличению вклада упругой компоненты σ_{el} . На рис. 3.15 это отражено пикообразным ростом силы трения F , что более подробно показано на рис. 3.14б. Температура смазки T на рис. 3.15 растет от кривой 1 до кривой 3. Как видно на вставке к рисунку, повышение T приводит к уменьшению высоты пика $F(V)$, что экспериментально наблюдалось в работе [12]. При превышении критического значения $V > V_{c0}$ смазка плавится, вклад от упругих напряжений σ_{el} становится незначительным, и дальнейший рост силы трения осуществляется в основном за счет увеличения вязкой составляющей напряжений σ_v .

3.4.3. Кинетика плавления и прерывистый режим

Подставляя в уравнение (2.34) энергию Φ (3.8), получим кинетическое уравнение в явном виде

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = a - 2\alpha(T - T_c)\varphi - b\varphi\varepsilon_{el}^2 + c\varphi^2 - d\varphi^3. \quad (3.17)$$

Для исследования кинетических процессов, проходящих в трибологической системе, показанной на рис. 1.21 следует совместно решать систему уравнений (2.31) и (3.17), при этом учитывая связь $\dot{X} = V$. Сила трения F в системе, как и ранее, определяется формулой (2.30) (поскольку используется выражение для вязкости (2.28)), натяжение пружины ΔX находим используя соотношение (2.32), а упругие напряжения σ_{el} рассчитываем по формулам (3.9), (2.16). Шаг интегрирования по времени выбирается равным $\Delta t = 10^{-8}$ с. Отметим, что в уравнении (3.17) в отличие от (2.36), (2.55) и (2.82) вместо кинетического коэффициента δ используется обратная величина $\tau_\varphi = 1/\delta$, имеющая смысл времени релаксации параметра порядка. Также в этом уравнении отсутствует флуктуационная добавка $\xi(t)$, поскольку (3.17) соответствует потенциалу с двумя ненулевыми минимумами (3.8), и здесь отсутствует "устойчивое" стационарное решение $\varphi = 0$.

Результат численных расчетов представлен на рис. 3.16. На рисунке показан прерывистый режим, во многом схожий по поведению с представленным на рис. 2.9, однако имеются и довольно выраженные качественные отличия,

поэтому приведем здесь краткое описание особенностей режима, показанного на рис. 3.16. В момент времени $t > 0$ внешний привод начинает движение с по-

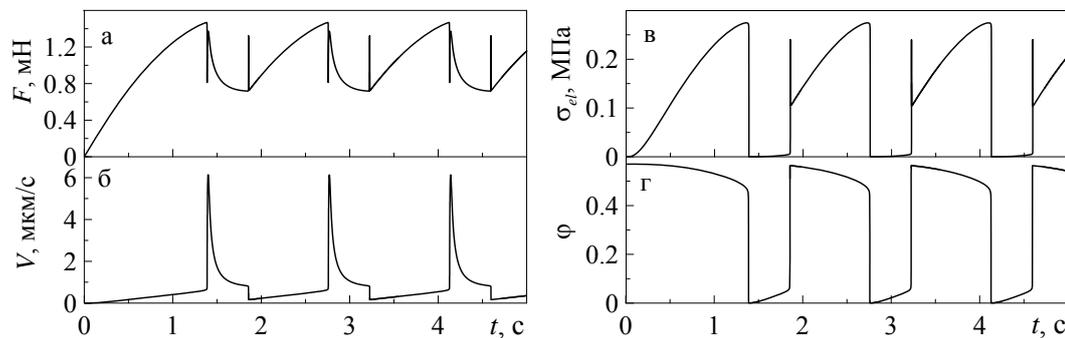


Рис. 3.16. Зависимости силы трения F (2.30), скорости движения V , упругих напряжений σ_{el} (3.9) и параметра порядка φ от времени t при параметрах рис. 3.14 и $M = 0,4$ кг, $K = 2000$ Н/м, $\tau_\varphi = 0,01$ Па·с, $T = 280$ К, $V_0 = 0,8$ мкм/с.

стоянной скоростью $V_0 = 0,8$ мкм/с. При этом пружина растягивается и растет движущая сила $K\Delta X$, что приводит в итоге к росту скорости блока V , упругих напряжений σ_{el} и силы трения F , а значение параметра порядка φ уменьшается. При выполнении условия $V > V_{c0}$ происходит плавление, после чего параметр порядка стремительно приобретает значение, соответствующее первому минимуму потенциала $\Phi(\varphi)$ (3.8). Упругие напряжения (3.9), пропорциональные квадрату параметра порядка, также становятся близкими к нулевому значению (см. рис. 3.16в). Сила трения F резко уменьшается, а скорость блока V стремительно растет, что приводит к резкому увеличению вязкой компоненты напряжений, и, соответственно, к увеличению полной силы трения F . После этого блок за короткое время проходит значительное расстояние, за счет чего уменьшается натяжение пружины ΔX и скорость блока V . Напомним, что при этом параметр порядка φ приобретает значение, соответствующее первому минимуму потенциала (3.8). При выполнении условия $V < V_c^0$ смазка затвердевает, а параметр порядка стремительно увеличивается до значения, соответствующего второму минимуму потенциала $\Phi(\varphi)$. Упругие напряжения σ_{el} увеличиваются, что приводит к росту силы трения F . При этом на зависимости $V(t)$ наблюдается резкое уменьшение скорости [131, 242, 243]. Далее описанный процесс периодически повторяется, но время до второго плавления существенно меньше, поскольку зна-

чение параметров ΔX и V уже отличны от нуля [12].

3.4.4. Влияние квазистатической силы трения

На рис. 3.17 приведены рассчитанные зависимости силы трения F и параметра порядка φ от времени t . Температура смазки последовательно увеличивается от рис. 3.17а до рис. 3.17г. В течение первых 3 с свободный конец пружины сдви-

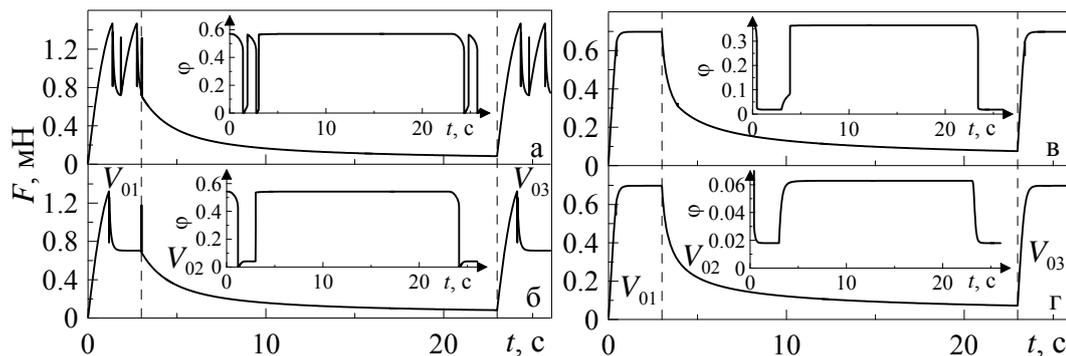


Рис. 3.17. Зависимости силы трения F (2.30) и параметра порядка φ (на вставках) от времени t при параметрах рис. 3.16. Скорость внешнего привода $V_{01} = V_{03} = 800$ нм/с, $V_{02} = 0$ м/с. Температуры смазки на панелях а–г равны $T_{1-4} = 280, 290, 333, 335$ К.

гается с постоянной скоростью $V_0 = 800$ нм/с, далее в течение времени $\tau_s = 20$ с привод неподвижен, после чего он снова движется со скоростью $V_0 = 800$ нм/с. Рис. 3.17а соответствует температуре $T_1 = 280$ К, и здесь на начальном этапе устанавливается прерывистый режим движения. Будем обозначать время от начала движения до первого акта плавления t_{melt1} . После остановки внешнего привода в момент времени $t = 3$ с блок продолжает движение за счет растянутой пружины, при этом наблюдается релаксация силы трения F . Стоит отметить, что скорость блока также уменьшается, но не становится нулевой, однако в пределе $t \rightarrow \infty$ скорость $V \rightarrow 0$. То есть в этом случае на реальных временах наблюдения $F(t) \neq 0$, поэтому можно считать, что при остановке привода устанавливается квазистатическая сила трения, которая не зависит от скорости. В момент времени $t = 23$ с внешний привод снова приводится в движение, после чего в системе устанавливается *stick-slip* режим. После возобновления движения время до первого плавления составляет $t_{melt2} < t_{melt1}$. Таким образом, время выхода на

стационарный режим работы трибологической системы после остановки уменьшается. Это связано с тем, что за время остановки параметры, определяющие поведение системы (сила трения F , упругие σ_{el} и вязкие σ_v напряжения, натяжение пружины ΔX , относительная скорость перемещения трущихся поверхностей V и т.п.) не успевают релаксировать до нулевых значений.

Рис. 3.17б построен при большем значении температуры $T_2 = 290$ К. В данном случае в системе наблюдается однократное плавление смазочного материала и установление режима жидкостного трения SF [12, 238]. Причем после плавления устанавливается режим со значением параметра порядка φ , соответствующего первому минимуму потенциала $\Phi(\varphi)$ (3.8), поэтому здесь смазка считается жидкоподобной. После остановки свободного конца пружины смазка затвердевает, а параметр порядка φ резко приобретает значение, которое соответствует второму минимуму зависимости $\Phi(\varphi)$. В данном случае время до первого плавления при начальном включении внешнего привода t_{melt1} также меньше времени до первого плавления после повторного включения привода t_{melt2} , по описанным выше причинам. Стоит отметить, что времена t_{melt1} и t_{melt2} уменьшаются с ростом температуры смазочного материала T , что подтверждается экспериментально [12].

Рис. 3.17в и рис. 3.17г построены при еще бóльших значениях температур и демонстрируют похожие зависимости. Однако, повышение температуры приводит к уменьшению максимального значения силы трения F [12, 204, 205, 227, 244] и стационарных значений параметра порядка φ . Рис. 3.17в построен при температуре $T_3 = 333$ К. Если смазочный слой зажат между атомарно-гладкими поверхностями, а его толщина составляет всего несколько атомарных диаметров (границная смазка), то температуры его плавления и затвердевания могут превышать значение температуры фазового перехода T_c для того же объемного смазочного материала. В рамках нашей модели эту особенность позволяет учесть первое линейное слагаемое в зависимости свободной энергии $\Phi(\varphi)$ (3.8). Поведение системы, показанное на рис. 3.17в, во многом аналогично изображенному на рис. 3.17б. При этом стационарные значения параметра порядка φ для первого и второго минимумов составляют $\varphi \approx 0,0184$ и $\varphi \approx 0,365$. Рис. 3.17г построен

при самой высокой температуре $T_4 = 335$ К. В данном случае при сдвиге реализуется стационарное значение параметра порядка $\varphi_0 \approx 0,018$, а после остановки внешнего привода $\varphi_0 \approx 0,0628$. Оба эти значения соответствуют первому минимуму потенциала $\Phi(\varphi)$ (3.8) (см. рис. 3.11 при температуре $T > T_A$), а отличаются они, поскольку при движении и остановке реализуются различные значения сдвиговой деформации ε_{el} (2.16), от которой согласно (3.10) зависит стационарное значение параметра порядка φ_0 .

Как уже отмечалось выше, высота пика ΔF на временной зависимости $F(t)$ перед плавлением смазки зависит от времени остановки внешнего привода τ_s . В рамках нашей модели такая особенность может быть продемонстрирована при вариации времен релаксации τ_φ . На рис. 3.18 представлены зависимости силы трения $F(t)$ для четырех значений τ_φ при трех различных значениях времен остановки внешнего привода τ_s . До первой вертикальной штриховой линии на всех па-

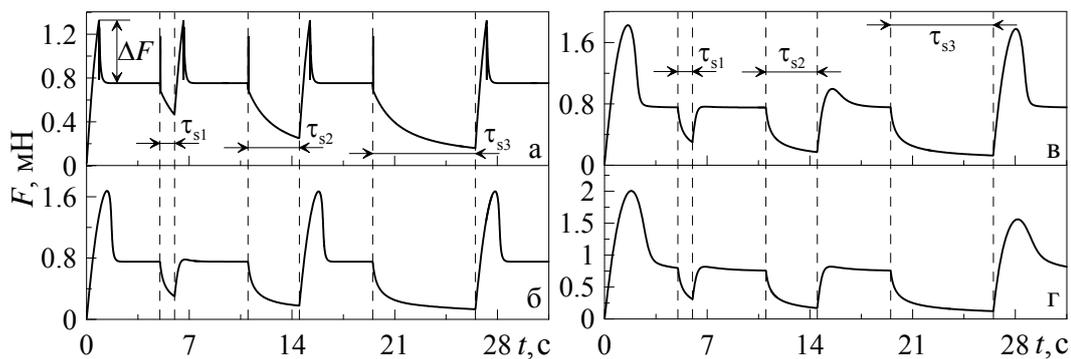


Рис. 3.18. Зависимости силы трения F (2.30) от времени t при параметрах рис. 3.16 и $T = 290$ К, $V_0 = 1000$ нм/с, $\tau_\varphi = 0,01; 100; 200; 350$ Па·с и постепенном увеличении времени остановки внешнего привода $\tau_{s1-s3} = 1; 3; 5; 7$ с.

неях на рис. 3.18 представлен выход системы на стационарный режим жидкостного трения, когда после плавления смазка остается жидкоподобной. В момент времени $t = 5$ с внешний привод останавливается на время $\tau_{s1} = 1$ с, после чего его снова приводят в действие. Как видно из рисунка, на зависимостях $F(t)$ после остановки длительностью τ_{s1} пик силы трения наблюдается только для наименьшего времени релаксации $\tau_\varphi = 0,01$ Па·с. Высота этого пика такая же, как и высота предыдущего [131]. Для остальных времен релаксации остановка длительностью $\tau_{s1} = 1$ с не приводит к затвердеванию смазки. Далее, в момент вре-

мени $t = 11$ с внешний привод останавливается на время $\tau_{s2} = 3,5$ с. За время остановки τ_{s2} смазка успевает затвердеть также и в случае $\tau_{\varphi} = 100$ Па·с, поскольку высота пика ΔF такая же, как и до первоначального плавления [131]. При значении $\tau_{\varphi} = 200$ Па·с (рис. 3.18в) после остановки длительностью τ_{s2} реализуется меньшая высота пика, поскольку за время остановки смазка твердеет частично, а параметр порядка не успевает принять значение, соответствующее первому пику на зависимости $F(t)$ [131]. Остановка привода продолжительностью $\tau_{s3} = 7$ с ($19,5$ с $< t < 26,5$ с) приводит к полному затвердеванию смазки в случаях $\tau_{\varphi} = 0,01, 100$ и 200 Па·с. Для четвертого случая $\tau_{\varphi} = 350$ Па·с остановки приводят лишь к частичному затвердеванию. Стоит отметить, что ”острота“ пиков на зависимости $F(t)$ существенно зависит от жесткости пружины K . С увеличением жесткости растет упругая сила $K\Delta X$, поэтому процесс плавления происходит быстрее и пик выглядит более ”острым“. Особенности, продемонстрированные на рис. 3.18, неоднократно наблюдались экспериментально. Такое поведение связано с тем, что для полного затвердевания смазочного материала после прекращения движения необходимо гораздо большее время, чем для объемных смазок, поскольку времена релаксации для граничных смазок могут быть больше на несколько порядков по сравнению с временами релаксации для тех же веществ в гидродинамическом режиме трения [12].

3.5. Выводы к разделу 3

1. Проведен учет универсальной зависимости вязкости высокомолекулярных алканов (смазок) от температуры и градиента скорости. Показано, что после плавления с ростом температуры сила трения продолжает уменьшаться за счет разжижения смазочного материала.

2. На основе трибологической системы, состоящей из двух блоков с атомарно-гладкими поверхностями, разделенными граничным слоем смазочного материала, теоретически описаны особенности широко распространенных *stop-start* экспериментов, когда система останавливается на определенное время, а затем вновь продолжает движение.

3. Выяснено, что при низких температурах смазки реализуется квазистатическая сила трения, позволяющая частично объяснить экспериментально наблюдаемые ”эффекты памяти“, при которых поведение системы в следующий момент времени зависит от ее предыдущего состояния.

4. Записано разложение свободной энергии, содержащее линейное слагаемое, которое также позволяет ввести в рассмотрение статическую компоненту силы трения. Численно найдены критические значения температур и скоростей плавления и затвердевания смазки. Установлено, что величина времени релаксации параметра порядка и времени остановки внешнего привода критически влияет на поведение системы. Показано, что результаты моделирования качественно воссоздают зависимости силы трения от времени, полученные экспериментально.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в статьях [29, 32, 36], статьях в материалах конференций [56, 58] и тезисах докладов на конференциях [66, 72].

РАЗДЕЛ 4

ВЛИЯНИЕ НА ГРАНИЧНЫЙ РЕЖИМ ТРЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННЫХ НЕОДНОРОДНОСТЕЙ И НАНОРАЗМЕРНЫХ НЕРОВНОСТЕЙ

В разделах 2 и 3 диссертационной работы рассмотрена ситуация, в которой поверхности трения являются атомарно-гладкими, а смазочный материал полагается однородным как по его толщине, так и по площади контакта. Это обусловлено в первую очередь тем, что экспериментально определяемые параметры, такие как сила трения, упругие и вязкие напряжения, температура и т.д. фактически представляют усредненные величины по всему объему смазочного материала. Однако, результаты, полученные методами молекулярной динамики, часто показывают неоднородные пространственные распределения указанных величин [245,246]. Поэтому в общем случае нанотрибологическую систему можно рассматривать как многомерную, неравновесную и пространственно-неоднородную [247,248]. В таких системах большую роль играют пространственные корреляции, обусловленные взаимодействием между частицами [249]. Причем корреляции могут быть дальнедействующими, что, как правило, критическим образом изменяет поведение объекта исследования по сравнению с однородным случаем. Такую систему можно представить в виде уравнений с частными производными, типа уравнений Навье-Стокса в гидродинамике [250], уравнений Максвелла в электродинамике [251,252], уравнений химической реакции с диффузией [253]. В частности, в работе [254] представлена модель пластической деформации металлов с учетом пространственной неоднородности, где для описания используются уравнения, схожие по математической структуре с используемыми нами ниже, поскольку в указанной статье рассматривается модель вязкоупругой среды [40], учитывающая сдвиговое плавление, результатом которого является наличие в смазке больших пластических деформаций. Целью данного раздела диссертации является изучение влияния пространственной неоднородности и наноразмерных шероховатостей поверхностей трения на кинетические режимы граничного трения.

4.1. Трение между двумя поверхностями с учетом наноразмерных неровностей

В последнее время активно развивается контактная механика шероховатых поверхностей [33, 34, 255–257]. Связано это в первую очередь с тем, что все без исключения природные объекты имеют фрактальные шероховатые поверхности [258, 259], поэтому любая контактная задача сводится к рассмотрению контакта двух или более шероховатых поверхностей. Сделанные утверждения не противоречат объекту, рассматриваемому в разделах 2 и 3 диссертационной работы, поскольку атомарно-гладкие поверхности в настоящее время получают искусственным путем и также активно исследуются. Однако, поскольку в нашем рассмотрении присутствует толщина смазочного материала h , мы также можем провести и обобщение на шероховатые поверхности, что и сделаем в данном подразделе. Стоит также отметить, что в режиме граничного трения часто нарушается известный закон Амонтона. Например, в экспериментах Гарди по трению двух плоских поверхностей, разделенных граничным слоем ароматических соединений [2], коэффициент статического трения с ростом нагрузки уменьшается. Гарди поясняет это тем, что малые давления соответствуют мультимолекулярному смазочному слою, не обладающему текучестью, свойственной объемным смазкам. Таким образом, существуют предельные внутренние напряжения, при превышении которых начинается течение. Гарди также приходит к выводу, что с повышением давления слой смазки становится тоньше, что и приводит к изменению коэффициента трения. Таким образом, Гарди вводит зависимость коэффициента трения от толщины смазки. В предлагаемом разделе как раз рассматривается ситуация, когда толщина смазочного слоя оказывает критическое влияние на режим трения.

4.1.1. Одномерная модель

Для генерации шероховатых поверхностей будем использовать стохастическую функцию Орнштейна-Уленбека $Y(X)$ [260, 261], где X – горизонталь-

ная координата точек шероховатой поверхности, а Y — соответствующая вертикальная координата (глубина шероховатости). Для численной реализации функции $Y(X)$ используется следующая итерационная процедура [260]:

$$Y_{n+1} = Y_n \left(1 - \frac{\Delta X}{\tau_Y} \right) - \frac{\sqrt{\Delta X}}{\tau_Y} W_n, \quad (4.1)$$

где τ_Y — коэффициент пространственной корреляции, а W_n — случайная величина, определяемая выражением (2.38). Рассмотрим систему, представленную на рис. 4.1. Система состоит из верхнего шероховатого блока, отделенно-

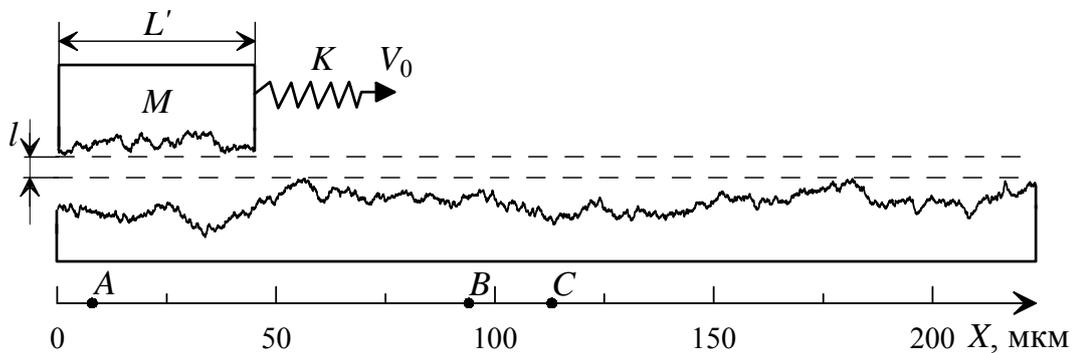


Рис. 4.1. Механический аналог трибологической системы с шероховатыми поверхностями (ср. с рис. 1.21), полученный при реализации итерационной процедуры (4.1) при параметрах $\delta k_B T = 1$, $\tau_Y = 200$, $\Delta X = 0,25$.

го от нижней поверхности смазочным слоем. Сперва рассмотрим простую одномерную модель с шероховатостью только в направлении движения X . Мы предполагаем, что расстояние между всеми точками верхней и нижней поверхности не изменяется в направлении, перпендикулярном направлению движения [262]. Минимальное расстояние l между поверхностями показано на рисунке штриховой линией. В последующих расчетах выбирается постоянное значение $l = 1$ нм. Пускай площадь верхней поверхности в случае отсутствия шероховатостей (площадь контактирующей плоскости) равна $A = 2 \cdot 10^{-9}$ м². Если верхний блок имеет квадратное сечение, длина одной его стороны составит $L' = \sqrt{A} = \sqrt{2 \cdot 10^{-9}} \approx 0,4472135955 \cdot 10^{-4}$ м.

Как отмечалось ранее, все поверхности, встречаемые в природе, являются фрактальными [258]. Существует несколько характеристик шероховатых поверхностей — это их фрактальная размерность, показатель Херста, среднеквадратич-

ная шероховатость, среднеквадратичный наклон, которые определяются видом спектральной плотности $C(q)$, где q – волновой вектор [33, 258, 263]. В частности, в работе [258] при обобщении большого количества результатов экспериментальных исследований реальных поверхностей показано, что все природные поверхности характеризуются показателем Херста H , значение которого находится в пределах $H \approx 0,7 \div 0,8$. Процедура моделирования трехмерных поверхностей, идентичных природным, приведена в работе [264]. Нами используется более простой подход моделирования одномерных неровностей (4.1), поскольку рассматривается ситуация, в которой в процессе движения между поверхностями сохраняется фиксированное расстояние. При этом шероховатости не приводят к непосредственному контакту друг с другом, а контакт осуществляется только через граничный смазочный слой. Целью такого подхода является не строгое описание контактной задачи при фиксированных параметрах, а демонстрация того, что несмотря на наличие шероховатостей, реализуется прерывистый режим движения, в котором зависимости результирующей силы трения от времени $F(t)$ близки к периодическим.

Точное описание трения шероховатых поверхностей, приведенных на рис. 4.1, представляет довольно сложную задачу, поскольку в процессе трения различные участки контакта за счет неоднородного распределения интенсивности диссипации механической энергии будут иметь различные температуры, также будет иметь место неоднородное течение смазочного материала. Многие в рассматриваемой задаче зависят и от толщины смазки, поскольку при малой ее толщине внутри более выраженных неровностей могут присутствовать поры, не заполненные смазкой, что в итоге приведет к уменьшению общей силы трения. Мы считаем, что такие поры отсутствуют, и все области заполнены смазкой, а выделяемая при движении тепловая энергия за счет тонкости смазочного слоя быстро поглощается массивными трущимися поверхностями, которые представляют термостат. Это позволяет предположить, что поверхности трения и смазочный материал имеют одинаковые температуры. Более того, ограничимся рассмотрением ситуации, в которой смазочный материал состоит из длинных полимерных мо-

лекул. В таком случае при сдвиге шероховатых поверхностей молекулы смазки касаются сразу нескольких шероховатостей, за счет чего течение смазки наблюдается и в "глубоких" неровностях. Но даже в рамках этих предположений задача все равно остается довольно сложной. Поскольку нашей целью не является точное описание процесса трения шероховатых поверхностей, а мы стремимся лишь показать, что наличие наноразмерных шероховатостей не приводит к существенному изменению прерывистого режима движения, для упрощения рассмотрим поведение системы, показанной на рис. 4.1 в рамках двух приближений, оба из которых являются довольно грубыми, однако позволяют установить общие закономерности при граничном трении шероховатых поверхностей.

4.1.1.1. Приближение невзаимодействующих доменов

Для начала будем считать, что в процессе трения смазочный слой имеет доменную структуру, состоящую из невзаимодействующих доменов, которая определяется распределением толщин смазки по площади контакта.

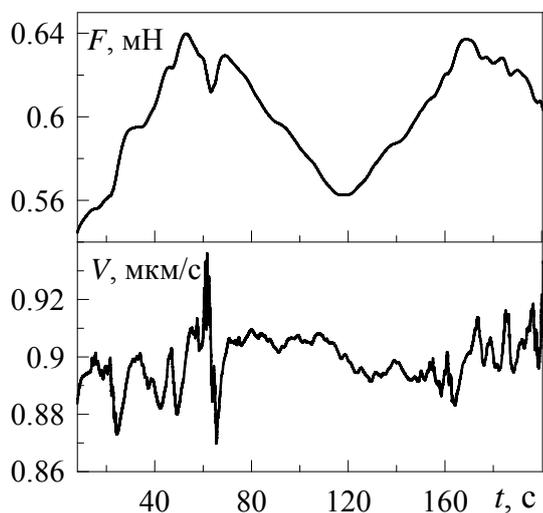


Рис. 4.2. Сила трения $F(t)$ и скорость $V(t)$ при параметрах рис. 2.19, рис. 2.23 и $l = 1$ нм, $L' = \sqrt{2} \cdot 10^{-9}$ м, $K = 250$ Н/м, $N = 1000$, $T = 200$ К, $V_0 = 900$ нм/с.

При этом процедура расчета временных зависимостей исследуемых величин в случае, показанном на рис. 4.1, аналогична используемой в разделах 2 и 3 диссертационной работы (при использовании потенциала (2.46) и выражения для вязкости (2.28)). Главное отличие здесь будет в том, что расстояние между поверхностями h не является постоянным. При решении уравнений движения мы разделим область контакта на N сегментов, после чего отдельно для каждого сегмента рассчитываются величины h_i , $\varepsilon_{el,i}$, φ_i , $\sigma_{el,i}$, F_i . Сила трения для каждого сегмента определяется с по-

мощью модифицированного выражения вида (ср. с (2.30))

$$F_i = \left[\sigma_{el,i} + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h_i} \right)^{\gamma+1} \right] \frac{L'^2}{N}, \quad (4.2)$$

где L'^2 — полная контактная площадь, а N — введенное ранее количество сегментов. После этого полная сила трения определяется как сумма $F = \sum F_i$, и после этого найденная величина используется для решения кинетического уравнения (2.31). Далее рассчитываются новые значения параметров X , V , ΔX , и процедура повторяется снова. Поскольку координата верхнего блока X увеличивается во время движения, согласно рис. 4.1 мы получаем индивидуальный набор толщин h_i в различные моменты времени, а временные зависимости главных величин ($F(t)$, $V(t)$ и т.д.) имеют стохастическую составляющую.

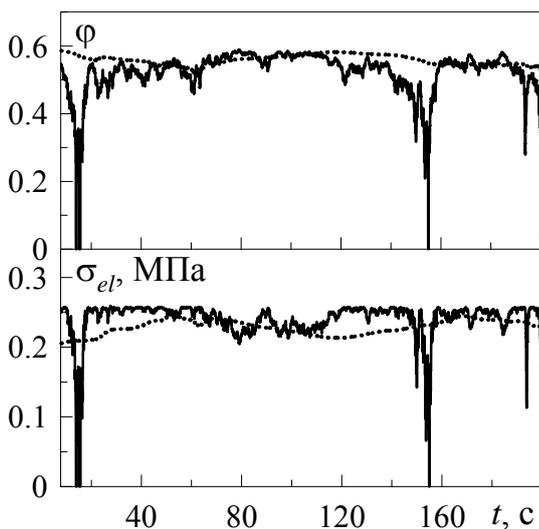


Рис. 4.3. Параметр порядка $\varphi(t)$ и напряжения $\sigma_{el}(t)$ для последнего домена верхней поверхности при параметрах рис. 4.2 (сплошные линии) и их средние значения по площади контакта (пунктирные линии).

На рис. 4.2 сплошными линиями показаны временные зависимости полной силы трения F и сдвиговой скорости V верхнего трущегося блока, полученные в результате реализации описанной выше процедуры для шероховатых поверхностей, показанных на рис. 4.1. На указанном рисунке видно, что обе величины изменяются во времени, а скорость V имеет стохастическую компоненту. В работе [40] для учета стохастических эффектов в основных уравнениях проводился дополнительный учет соответствующих стохастических слагаемых, в то время как здесь стохастическое поведение является результатом наличия шероховатостей

трущихся поверхностей. Рис. 4.2 показывает, что система обладает свойствами сухого трения, поскольку сила трения F имеет довольно большие значения, подобные приведенным на рис. 2.23. Однако, не все домены в контактной области имеют твердоподобную структуру на протяжении рассматриваемого времени движения. Это следует из результатов, представленных на рис. 4.3, где сплошны-

ми линиями показаны временные зависимости параметра порядка $\varphi(t)$ и упругих напряжений $\sigma_{el}(t)$ для последнего домена на верхней поверхности трения. Здесь видны моменты времени, в течение которых смазка находится в жидкоподобном состоянии ($\varphi = 0, \sigma_{el} = 0$). Но большая часть доменов на протяжении трения все же имеет твердоподобную структуру, поэтому в системе в целом наблюдается режим сухого трения. Об этом свидетельствуют и зависимости от времени средних по площади контакта значений $\langle \varphi \rangle(t)$ и $\langle \sigma_{el} \rangle(t)$, которые показаны на рис. 4.3 пунктирными линиями. Зависимости на рис. 4.2 и рис. 4.3 приведены с момента времени $t > 8$ с, когда проходят переходные процессы и устанавливается "стационарный" режим трения.

На рис. 4.4 показаны временные зависимости полной силы трения F и координаты X для процесса трения двух шероховатых поверхностей (рис. 4.1) при большем значении скорости движущего блока V_0 . В соответствии с рисунком в

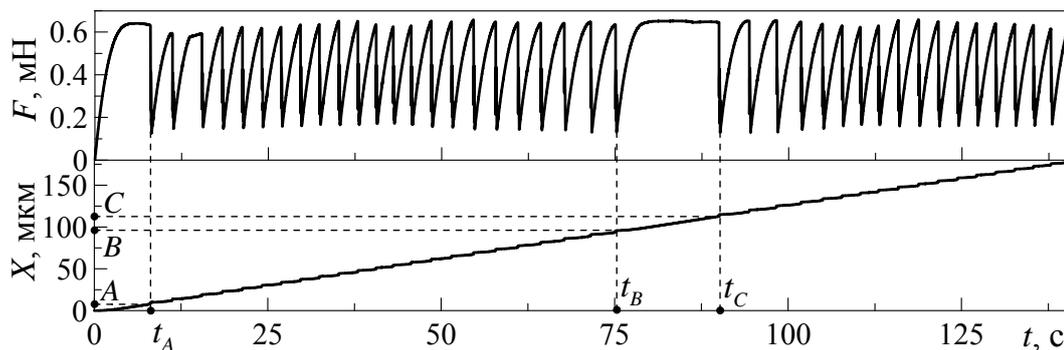


Рис. 4.4. Зависимости силы трения F и координаты верхнего трущегося блока X от времени t при параметрах рис. 4.2 и скорости сдвига $V_0 = 1280$ нм/с.

системе устанавливается прерывистый (*stick-slip*) режим движения [265, 266]. Но этот режим не является строго периодическим, потому как частота фазовых переходов и амплитуда силы трения изменяется во времени. К этому приводят шероховатости верхней и нижней поверхностей трения, показанных на рис. 4.1. В начале движения на временном интервале $t < t_A$ система находится в режиме сухого трения с большим значением силы трения F . На интервалах $t_A < t < t_B$ и $t > t_C$ реализуется прерывистый режим движения. Однако, в промежуточном интервале времени $t_B < t < t_C$ существенно большее количество доменов имеет твердоподобную структуру с ненулевым значением модуля сдвига μ (2.6), а три-

биологическая система в целом демонстрирует свойства сухого трения. На нижней панели рис. 4.4 на оси X выделены три характерные временные точки — A , B и C . Эти точки соответствуют моментам времени t_A , t_B и t_C . Эти же точки показаны на рис. 4.1. Согласно рис. 4.4, точки A , B и C — это координаты левой стороны верхнего трущегося блока в моменты времени, когда происходят переходы между различными кинетическими режимами трения.

На рис. 4.5 приведены зависимости скорости движения $V(t)$ верхнего трущегося блока и его координаты $X(t)$. Из рисунка следует, что на протяжении вре-

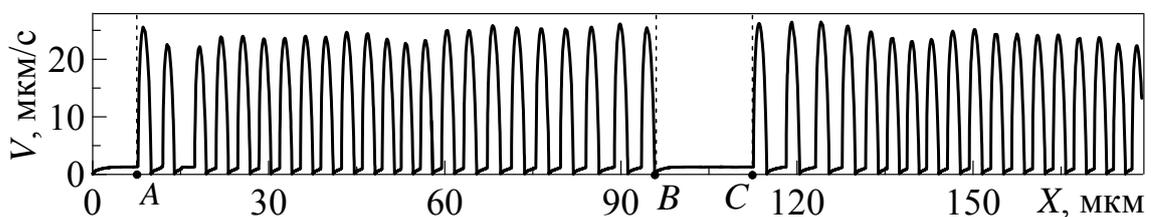


Рис. 4.5. Зависимости скорости верхнего блока V от его координаты X при параметрах рис. 4.4.

менных интервалов, когда система находится в твердоподобном состоянии, скорость движения V принимает малые значения. Координатная зависимость скорости на этом рисунке характеризуется непостоянной амплитудой и частотой. Стоит отметить, что координатная зависимость сдвиговой скорости $V(X)$ имеет параболическую форму. Изучение зависимостей трибологических параметров от координаты верхнего трущегося блока X можно также найти в работе [267].

4.1.1.2. Приближение средней толщины

В этом подразделе будем считать, что при трении основополагающую роль играют усредненные значения параметра порядка, упругих деформаций, и т.д. В рамках такого предположения достаточно решать систему уравнений (2.31), (2.55), содержащую единственное кинетическое уравнение для параметра порядка, а силу трения определять как (ср. с (2.30))

$$F = \left[\sigma_{el} + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{\langle h \rangle} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (4.3)$$

где $\langle h \rangle$ — средняя толщина смазочного слоя, которая в ситуации, показанной на рис. 4.1, за счет движения верхней трущейся поверхности будет функцией времени t . Результаты соответствующего моделирования показаны на рис. 4.6,

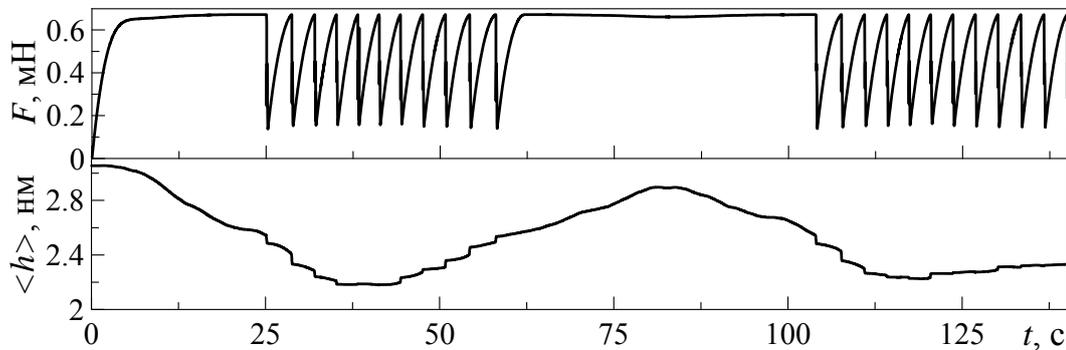


Рис. 4.6. Зависимости силы трения F (4.3) и средней толщины смазочного материала $\langle h \rangle$ от времени t при параметрах рис. 4.4.

на котором приведены зависимости силы трения F , а также средней толщины смазочного материала $\langle h \rangle$ от времени t . Из рисунка следует, что при большом значении средней толщины смазки $\langle h \rangle$ реализуется сухое трение с максимальной силой трения F , а когда толщина $\langle h \rangle$ становится меньше определенной величины, режим сухого трения сменяет прерывистый режим движения. Это происходит за счет того, что при уменьшении толщины смазки увеличивается градиент скорости $V/\langle h \rangle$, что приводит к ее плавлению [13]. Результаты, представленные на рис. 4.6, качественно повторяют аналогичные зависимости, полученные в рамках приближения невзаимодействующих доменов. В обоих случаях прерывистый режим движения близок к периодическому. Однако, в приближении средней толщины зависимости, представленные на рис. 4.3, теряют смысл, поскольку по всей площади контакта рассчитывается единственное среднее значение параметра порядка $\varphi(t)$.

Таким образом, в рамках двух приближений, исходящих из различных представлений о процессе трения, выяснено, что при наличии наноразмерных шероховатостей в режиме граничного трения прерывистый режим близок к периодическому в ситуации, когда между поверхностями трения поддерживается фиксированное расстояние, а неровности в процессе трения контактируют только через смазку, и не соприкасаются.

В экспериментальной работе [268] при исследовании граничного трения шероховатых поверхностей, разделенных ультратонким слоем смазочного материала, показано, что плавление смазочного слоя происходит неоднородно, что подтверждает выводы, сделанные в рамках приближения невзаимодействующих доменов. Однако, в настоящей диссертационной работе рассматривается контакт поверхностей, когда в процессе трения площадь контакта не изменяется (она всегда равна площади сечения верхней трущейся поверхности), как это происходит в [268], поэтому полученные результаты отличаются от приведенных в работе [268], что не позволяет провести их численное сравнение.

4.1.2. Трехмерная модель

Трехмерный случай будем рассматривать в рамках приближения невзаимодействующих доменов. При этом поверхности будем генерировать с помощью метода, который учитывает только длинноволновые неровности. При этом получаемые поверхности визуально являются гладкими, но не плоскими, а "холмистыми". Как это выяснено выше, коротковолновые неровности в рассматриваемой задаче не вносят большого вклада, поскольку процесс трения фактически сводится к эволюции средних по площади контакта величин. Для генерирования трехмерных поверхностей с наноразмерными неровностями будем использовать широко известный холмовый алгоритм (Hill Algorithm). Указанный алгоритм является итерационным и состоит в следующем. Сперва создается двумерный массив размером $N \times N$ и заполняется нулевыми значениями. Значение элемента массива — это высота z точки поверхности, индексы элемента — целочисленные координаты точки (x, y) . Таким образом, изначально имеем плоскость. Затем случайным образом выбираются координаты (x_r, y_r) , причем они могут выбираться и за пределами массива (поверхности). На этом же этапе генерируется еще одна случайная величина — радиус "холма" r . Диапазон случайных величин r существенно влияет на окончательный вид поверхности. Далее для всех элементов

массива (точек поверхности) (x, y) рассчитывается значение высот z согласно формуле

$$z = r^2 - (x - x_r)^2 - (y - y_r)^2. \quad (4.4)$$

В случае $z(x, y) > 0$ высота z прибавляется к значению соответствующего элемента массива. Далее снова генерируется случайная точка (x_r, y_r) , случайный радиус r , и описанные действия повторяются снова. Пускай процедура повторяется n раз. Отметим, что величина n существенно влияет на характер получаемой поверхности. После окончания описанной процедуры проводится масштабирование высот поверхности z от 0 до 1, и полученная поверхность “опускается” к нулевому уровню. Это легко осуществить, если все полученные высоты $z(x, y)$ пересчитать согласно соотношению

$$z := \frac{z - z_{\min}}{z_{\max} - z_{\min}}, \quad (4.5)$$

где z_{\min} , z_{\max} — минимальное и максимальное значение координаты z в массиве до его масштабирования. В нашем случае верхняя поверхность в плоскости xy имеет 200×200 точек, нижняя — 400×200 . Случайная величина радиуса r для обеих поверхностей выбиралась в диапазоне от 0 до 50. Количество итераций для верхней поверхности $n = 1000$, для нижней $n = 2000$, поскольку ее площадь в два раза больше. Координаты x_r, y_r при генерировании обеих поверхностей выбирались в диапазоне массива, т.е. для верхней поверхности обе координаты выбирались в пределах от 0 до 199, а для нижней — $y \in [0, 199]$, $x \in [0, 399]$. После формирования таким образом поверхностей каждое значение z было возведено в квадрат, что позволяет края поверхностей “прижать” к низу, а выступы сделать более высокими по сравнению с общей картиной.

После описанной процедуры полученные поверхности необходимо подготовить для рассматриваемой задачи. Поскольку верхняя поверхность будет скользить по нижней, все ее точки следует зеркально отобразить относительно плоскости xy вниз, т.е. все элементы массива верхней поверхности пересчитываются согласно соотношению $z := 1 - z$. Далее, чтобы избежать пересечения плоскостей (значения высот верхней и нижней поверхностей находятся в диапазоне

от 0 до 1), при каждой фиксированной координате y для верхней поверхности находится минимальное значение высоты z_{\min} , а для нижней — максимальное z_{\max} и определяется величина $\Delta z = z_{\min} - z_{\max}$. Таким образом, получаем 200 значений Δz для всех имеющихся осей y . Из этих значений выбирается минимальное Δz_{\min} , и верхняя поверхность согласно замене ее элементов $z := z - \Delta z_{\min}$ приводится в соприкосновение с нижней по ходу движения. Теперь поверхности при перемещении не будут перекрываться, однако в некоторых точках (по крайней мере в одной) соприкасаются. Далее каждый элемент обоих массивов поверхностей умножается на величину $l = 10^{-9}$ м, после чего верхняя поверхность "приподнимается" на 0,5 нм согласно замене $z := z + 0,5 \cdot 10^{-9}$ м. Выберем линейный размер сторон верхней квадратной поверхности $L' = 1,2 \cdot 10^{-5}$ м, тогда площадь ее сечения составит $A = L'^2 = 0,144 \cdot 10^{-9}$ м², а расстояние между точками по осям x и y на обеих поверхностях будет равно

$$S_{x,y} = \frac{L'}{200}, \quad (4.6)$$

что при выбранных параметрах приводит к значению $S_{x,y} = 6 \cdot 10^{-8}$ м.

На рис. 4.7 показаны сгенерированные шероховатые поверхности в виде карт высот, где координаты x и y представляют пространственные координаты, выраженные в микрометрах, а за начало отсчета взят левый нижний угол. На рисунке на легенде оттенками серого выделены значения высот поверхностей в на-

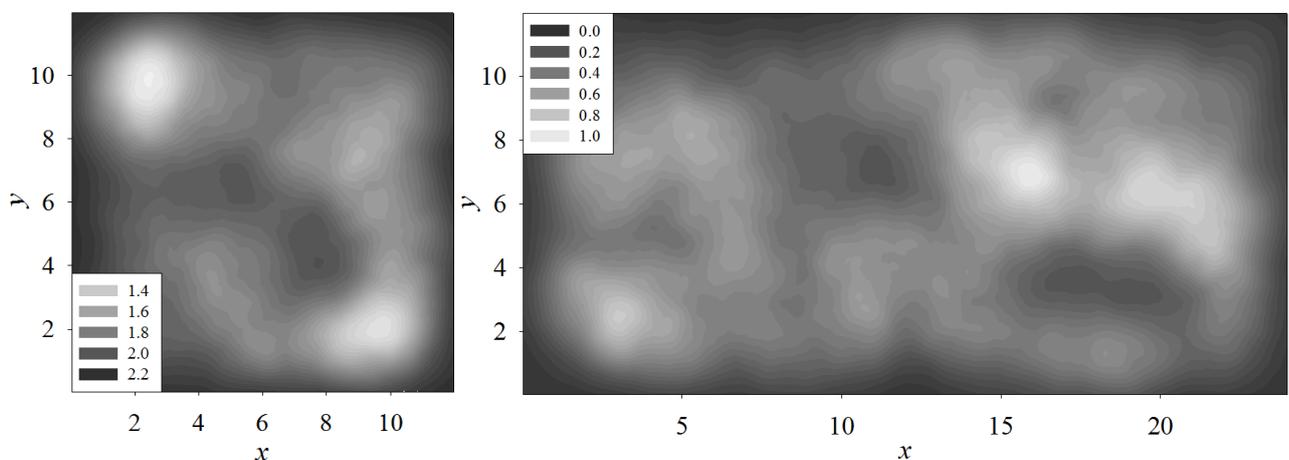


Рис. 4.7. Карта высот верхней (слева) и нижней (справа) трущихся поверхностей после масштабирования. Координаты x и y приведены в микрометрах, а высоты на легендах — в нанометрах.

нометрах. Поскольку при подготовке верхней поверхности она была инвертирована, выступы на ней отвечают меньшим значениям z . Поэтому для того, чтобы на рис. 4.7 на обеих поверхностях выступам соответствовали светлые участки, значения высот на левой поверхности увеличиваются от светлого к темному, а на правой — наоборот. Отметим, что на полученных поверхностях присутствуют только длинноволновые шероховатости, и поверхности не обладают фрактальными свойствами. Поэтому они могут быть получены исключительно искусственным путем. Для этого можно, к примеру, использовать метод наноструктурирующего выглаживания, который в зависимости от параметров процесса позволяет получать поверхности с различными свойствами, в том числе и имеющие периодическую структуру [30, 63, 269, 270].

Рассмотрим кинетику трибологической системы, показанной на рис. 1.21, где в роли верхней и нижней трущихся поверхностей выступают поверхности, показанные на рис. 4.7. Для этого необходимо численно решать систему дифференциальных уравнений (2.31), (2.55) с учетом определений (2.5), (2.6), (2.30), (2.16), (2.35). Поскольку область контакта содержит $200 \times 200 = 40000$ доменов, на каждом шаге численного интегрирования для всех доменов в отдельности определяются величины $h[i][j]$, $\varepsilon_{el}[i][j]$, $\varphi[i][j]$, $\sigma_{el}[i][j]$, $F[i][j]$, где i — целочисленный индекс точки поверхности по оси X , а j — индекс, соответствующий оси Y (оба индекса изменяются от 0 до 199). При этом полагаем, что температура смазки T постоянна для всех доменов, что соответствует случаю ультратонкой смазки, когда избыточное тепло, возникающее при движении в зоне контакта, быстро передается поверхностям трения (термостату, который представляет окружающую среду). Отметим, что в процессе движения верхней поверхности величины $h[i][j]$ будут изменяться, поскольку эти высоты представляют расстояние между соответствующими точками верхней и нижней трущихся поверхностей. Для учета этого факта вводится целочисленная переменная

$$s' = \text{integer} \left(\frac{X}{S_{x,y}} \right), \quad (4.7)$$

описывающая сдвиг верхней поверхности относительно нижней. Здесь X — ко-

ордината верхней трущейся поверхности, в начале движения при $t = 0$ равная нулю, а $S_{x,y}$ (4.6) – расстояние между точками поверхности по оси X . Тогда $h[i][j]$ легко определить как

$$h[i][j] = \text{top}[i][j] - \text{bottom}[i + s'][j], \quad (4.8)$$

где $\text{top}[200][200]$ – массив, содержащий масштабированные высоты верхней поверхности, $\text{bottom}[400][200]$ – массив высот нижней. Из выражения (4.8) видно, что сдвиг верхней поверхности производится в направлении оси X , потому как координаты Y (индекс j) для обеих поверхностей в процессе движения не изменяются. При численном решении уравнения движения (2.31) будем на каждом временном этапе для всех доменов в отдельности численно решать дифференциальное уравнение (2.36), определяя текущие значения величин параметра порядка $\varphi[i][j]$, которые зависят от предыдущих значений массива $\varphi[i][j]$. В начале движения ($t = 0$) всем элементам массива $\varphi[i][j]$ присваивается значение $\varphi^0 = 0,5$, т.е. изначально смазка однородна по пространству и находится в твердоподобном состоянии. Далее, зная значения параметра порядка для всех доменов, вклад в силу трения от каждого из них рассчитывается по модифицированной формуле (2.30):

$$F[i][j] = \left[\sigma_{el}[i][j] + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h[i][j]} \right)^{\gamma+1} \right] \frac{L^2}{N^2}, \quad (4.9)$$

где $A = L^2 = 0,144 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$ – ранее введенная площадь области контакта, N^2 – общее количество доменов. После расчета значений (4.9) действующая сила трения определяется как сумма всех элементов массива (всего $N^2 = 40000$), и это значение используется для решения кинетического уравнения (2.31). При этом находятся новые значения X , V , ΔX , и процедура повторяется снова. В уравнении (4.9) скорость V не имеет индексов, поскольку верхняя поверхность полагается абсолютно жесткой и движется как единое целое.

Для численного интегрирования описанных уравнений используется итерационный метод Эйлера [43, 48, 201] с шагом по времени $\Delta t = 10^{-7}$ с. Итерационная процедура проводится до тех пор, пока значение целочисленной переменной сдвига s' (4.7) не станет равным 200, т.е. пока верхняя поверхность не дойдет до

конца нижней. При выбранных параметрах для этого требуется более $9 \cdot 10^7$ итераций, и на каждой итерации необходимо рассчитывать $N^2 = 40000$ значений массивов $h[i][j]$, $\varepsilon_{el}[i][j]$, $\varphi[i][j]$, $\sigma_{el}[i][j]$, и в итоге $F[i][j]$, что существенно замедляет численный счет, делая его неосуществимым на современном персональном компьютере. Однако, поскольку в рамках предлагаемого подхода домены не взаимодействуют друг с другом, значения массивов на каждом шаге также вычисляются независимо. Это позволяет с высокой эффективностью применить для вычислений разработанную компанией NVIDIA в 2007 году параллельную архитектуру CUDA [271], которая используется для выполнения неграфических вычислений на универсальных графических процессорах (GPU) видеокарт компании NVIDIA. Поскольку уравнение движения (2.31) после вычисления значения полной силы трения F как суммы элементов (4.9) рассчитывается на центральном процессоре (CPU), его частота также существенно влияет на общее время численного счета. Нами использовалась система на основе центрального процессора Intel Core 2 Quad Q9400, работающего на частоте 2,66 ГГц, и видеокарта Palit GeForce GTX 570 Sonic 1280MB, имеющая 480 универсальных процессоров, каждый из которых работает на частоте 1,4 ГГц. При этом время выполнения программы (расчета зависимостей, приведенных на рис. 4.8) составило 5 часов 32 минуты. При расчетах использовались параметры $a = 2 \cdot 10^{12}$ Па, $b = 230$ Дж/м³, $c = 900$ Дж/м³, $\alpha = 0,95$ Дж·К⁻¹/м³, $T_c = 290$ К, $\tau_\varepsilon = 10^{-8}$ с, $k = 1,5 \cdot 10^5$ Па·с^{1/3}, $\gamma = -2/3$, $\delta = 100$ Дж⁻¹·м³/с, $M = 0,5$ кг, $K = 600$ Н/м, $V_0 = 1400$ нм/с, $T = 200$ К [37].

Полученные в результате решения указанных уравнений зависимости показаны на рис. 4.8. При выбранной температуре T в состоянии покоя смазка твердopodobна. В момент времени $t = 0$ свободный конец пружины начинает равномерное движение со скоростью $V_0 = 1,4$ мкм/с. На начальном этапе переменная s' (4.7), описывающая сдвиг, принимает нулевое значение, поэтому с ростом скорости V для всех доменов возрастают компоненты силы трения (4.9). За счет увеличения скорости сдвига также увеличиваются значения упругих деформаций $\varepsilon_{el}[i][j]$, что приводит к росту упругих компонент напряжений $\sigma_{el}[i][j]$. С те-

чением времени увеличивается координата X , устанавливается ненулевое значение s' (4.7), и происходит пересчет $h[i][j]$. Это приводит к нарушению периодичности зависимостей, что особенно видно на зависимости $V(t)$. Для каждого домена

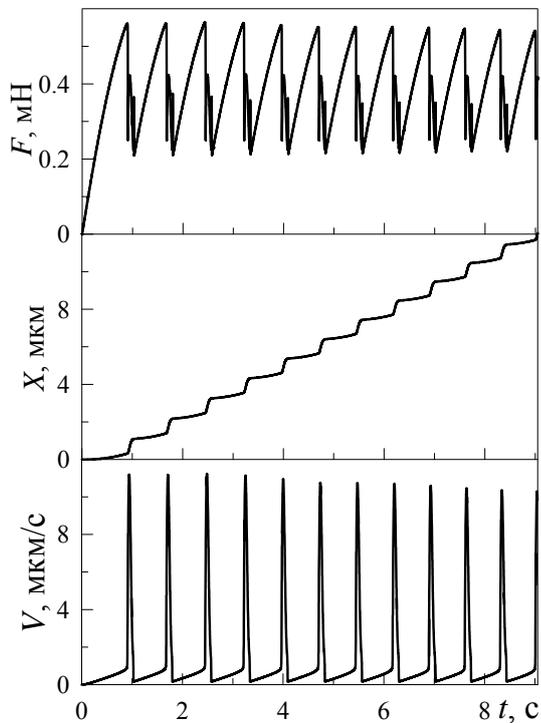


Рис. 4.8. Зависимости силы трения F , координаты верхнего блока X и его скорости V от времени t .

выполнение условия плавления $V > V_{c0}$ будет происходить в различные моменты времени, поскольку критическая скорость V_{c0} (2.51) пропорциональна расстоянию между "плоскостями" поверхностей $h[i][j]$, которые ограничивают соответствующие домены. Поэтому в каждый момент времени смазка в одних местах поверхности твердоподобна, а в других жидкоподобна. Однако, как это видно из рисунка, существуют моменты времени, когда скорость движения V многократно увеличивается. Эта ситуация соответствует полному плавлению смазочного материала, поскольку при многократном увеличении V для всех доменов выполняется условие $V > V_{c0}$. При плавлении напряжения $\sigma_{el}[i][j]$ принимают нулевое значение, за счет чего и возрастает скорость проскальзывания верхнего трущегося блока V , потому как упругие составляющие сил трения $F[i][j]$ становятся равными нулю. При этом верхний блок быстро перемещается на большое расстояние, о чем свидетельствует увеличение угла наклона зависимости $X(t)$ к оси абсцисс после плавления. Поскольку теперь блок движется со скоростью V , которая существенно превышает скорость движения свободного конца пружины V_0 , пружина сжимается, уменьшается натяжение ΔX , а вместе с ним и упругая сила $K\Delta X$, приводящая к движению. Условие $V < V_c^0$ (2.25) опять же для всех доменов выполняется в разное время, поэтому при затвердевании формируется неоднородная доменная структура. Стоит отметить, что хотя зависимости, приведенные на рис. 4.8, не являются строго периодическими, они близки к периодическому виду, что подтверждают

также исследования поведения взаимодействующих шероховатых поверхностей при их взаимном перемещении с учетом упругости [263]. Отметим, что прерывистый режим движения *stick-slip*, показанный на рис. 4.8, наблюдался Боуденом и Тейбором более 60 лет назад [111] при проведении экспериментов по определению влияния молекулярного веса полимеров на коэффициент трения.

Рассмотрим более подробно переход между кинетическим режимом скольжения и сухим трением. На рис. 4.9 приведены зависимости силы трения F и скорости скольжения V от времени, показанные на рис. 4.8, однако для ограниченного промежутка времени t . На рисунке выбраны четыре момента времени, для кото-

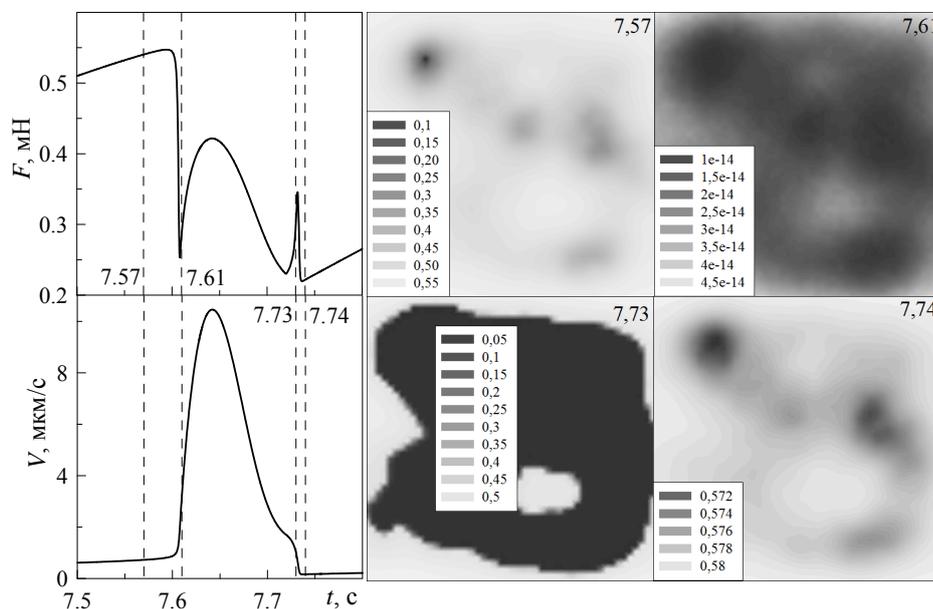


Рис. 4.9. Зависимости $F(t)$ и $V(t)$, приведенные на рис. 4.8, на отрезке времени $t \in [7, 5; 7, 8]$ (с) и распределение значений параметра порядка $\varphi(x, y)$ по площади контакта поверхностей для четырех выбранных моментов времени $t = 7, 57; 7, 61; 7, 73; 7, 74$ (с).

рых показаны распределения значений параметра порядка φ по площади скольжения. Координаты x и y на этих рисунках соответствуют значениям, показанным на рис. 4.7 для верхней трущейся поверхности. Координаты X точек поверхностей верхнего трущегося блока могут быть рассчитаны как

$$X = x + s'S_{x,y}, \quad (4.10)$$

где переменная сдвига s (4.7) для 4-х увеличивающихся на рис. 4.9 моментов времени принимает значения 161, 162, 174, 174. Проанализируем полученные данные. Как видно на зависимости $F(t)$, в момент времени $t = 7, 57$ с в

системе реализуется режим сухого трения, характеризующийся высоким значением силы трения и малой величиной скорости сдвига V . На соответствующем пространственном распределении $\varphi(x, y)$ видно, что параметр порядка практически везде принимает значение $\varphi > 0$, однако присутствуют темные участки, где смазка близка к жидкоподобному состоянию. Поскольку количество доменов с твердоподобной смазкой многократно превышает количество доменов с жидкоподобной структурой, устанавливается режим сухого трения. Момент времени $t = 7,61$ с соответствует режиму скольжения, поскольку сила трения F резко уменьшается, а скорость сдвига V растет. Если посмотреть на соответствующую зависимость $\varphi(x, y)$, видно, что по всей площади контакта реализуются значения $\varphi \sim 10^{-14}$, что отвечает уровню выбранной интенсивности белого шума в (2.35). Таким образом, все домены находятся в расплавленном состоянии. В следующий рассматриваемый момент времени $t = 7,73$ с происходит увеличение силы трения F , а также снижение скорости V (на зависимости $V(t)$ при возрастании F в окрестности выбранного времени наблюдается перегиб). Таким образом, система переходит в режим сухого трения. Однако, как видно из соответствующего рисунка $\varphi(x, y)$, не все домены при этом имеют твердоподобную структуру. Жидкоподобной структурой в этот момент времени обладает даже большее количество доменов (темные участки зависимости). И после полного затвердевания ($t = 7,74$ с) все домены характеризуются значением $\varphi > 0$, однако на соответствующей зависимости $\varphi(x, y)$ есть более темные участки, для которых модуль сдвига принимает меньшие значения. Отметим, что зависимости $\varphi(x, y)$ для последних двух моментов времени характеризуются одинаковыми величинами $s' = 174$. Таким образом, их принципиальное отличие вызвано не изменением набора значений $h[i][j]$, а релаксационными процессами в смазочном слое. Если же параметр s' при движении долгое время остается постоянным, картина $\varphi(x, y)$ полностью определяется набором $h[i][j]$ при других фиксированных параметрах. Это происходит за счет того, что при выбранном значении кинетического коэффициента δ происходит быстрая релаксация параметра порядка φ к устойчивому значению, определяемому величиной h . Однако, в нанотрибологических систе-

мах, по сравнению с объемными смазками, времена релаксации могут отличаться на порядки величин в зависимости от созданных условий, поэтому варьированием значения δ при необходимости можно добиться качественного описания различных наблюдаемых экспериментально эффектов, таких, например, как эффекты памяти, когда время релаксации напряжений многократно превышает время наблюдения процессов в эксперименте [12], что и сделано в разделе 3 диссертационной работы. Отметим, что зависимость силы трения от времени, приведенная на рис. 4.9, имеет особенности (два максимума после плавления), причины которых подробно описаны в подразделе 2.2.1.5 настоящей диссертационной работы.

4.2. Влияние пространственной неоднородности

4.2.1. Процедура моделирования

В выражении для разложения свободной энергии (2.46) присутствует градиентное слагаемое $g (\nabla\varphi)^2 / 2$, описывающее неоднородное распределение параметра порядка φ . Однако, в разделах 2 и 3 диссертационной работы рассматривается однородный случай, когда $g \equiv 0$. Проведем здесь исследование кинетики трибологической системы, показанной на рис. 1.21 в неоднородном случае, когда $g \neq 0$ ¹². В этом случае кинетическое уравнение (2.34) следует заменить на

$$\dot{\varphi} = -\delta \frac{\delta\Phi}{\delta\varphi} + \xi(t), \quad (4.11)$$

где $\delta\Phi/\delta\varphi$ – вариационная производная [272].

Для упрощения дальнейшего численного анализа рассмотрим двумерную задачу. При этом мы предполагаем, что за счет тонкости смазочного слоя и фикси-

¹²Для определения значений параметра g можно рассмотреть систему, в которой слева находится одна фаза, а справа другая. При этом можно найти решение уравнений равновесия, переходящих от одного однородного решения к другому. После этого легко определить энергию границы раздела (на единицу площади), которая будет определяться всеми параметрами системы, но прежде всего коэффициентом g при градиенте. Тем самым коэффициенты будут связаны с поверхностной энергией границы раздела. Такой подход использовался в частности в теории сверхпроводников. Стоит отметить, что градиентный член разложения может быть и отрицательным, что соответствует отрицательной поверхностной энергии и приводит к мелкодисперсному фазовому расслоению (спинодальный распад). В режиме граничной смазки спинодальный распад до сих пор экспериментально не наблюдался, поэтому на основании экспериментальных данных можно предполагать, что коэффициент при градиенте положительный.

рованного расстояния между поверхностями трения по толщине смазочный слой можно считать однородным. В этом случае кинетическое уравнение (4.11) запишется в явном виде:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\delta (2\alpha (T - T_c) \varphi + a\varphi \varepsilon_{el}^2 - b\varphi^2 + c\varphi^3) + g\delta \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + \xi(t), \quad (4.12)$$

где x и y — координаты по площади смазки. Уравнение (4.12) является двумерным дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа [273]. Процедура численного решения такого типа уравнений хорошо известна. Приведем здесь краткое описание ее основных этапов.

Сначала разобьем пространственные координатные оси x и y , а также ось времени t на определенное количество равных отрезков. При этом решение задачи на всей пространственно-временной области сводится к определению значений узлов трехмерной разностной сетки (см. рис. 4.10а). Пускай n — порядковый номер

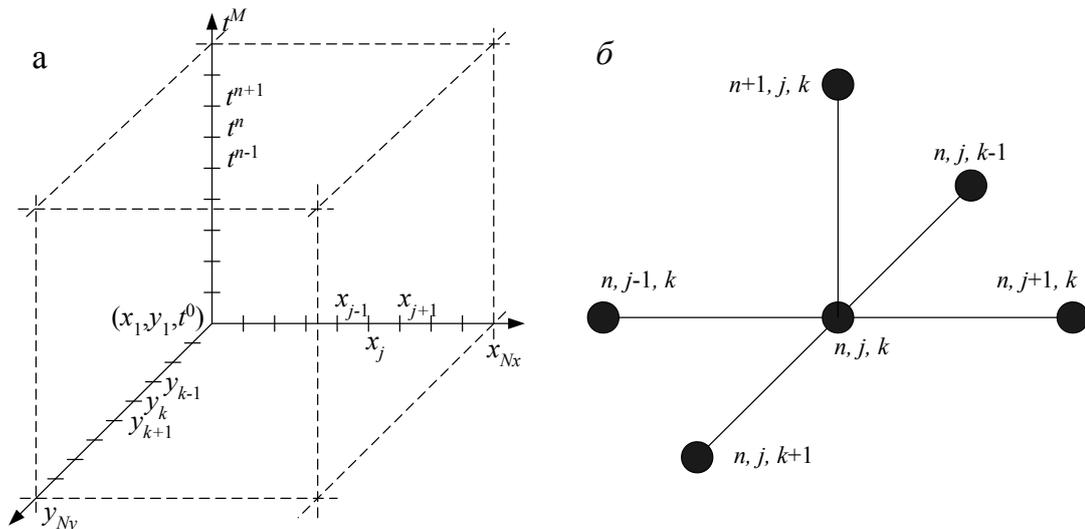


Рис. 4.10. (а) трехмерная разностная сетка для решения уравнения (4.18) [(4.19)]; (б) разностный шаблон, характеризующий явную разностную схему (соотношения (4.15)–(4.17)).

точки деления по оси t , j — по оси x и k — по оси y . При этом эти порядковые номера принимают следующие значения:

$$\begin{aligned} n &= 0, 1, 2, \dots, M; \\ j &= 1, 2, 3, \dots, N_x; \\ k &= 1, 2, 3, \dots, N_y. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Согласно (4.13) значения переменных x , y и t в произвольной точке пространственно-временной сетки будут определяться как

$$\begin{aligned} t^n &= n\Delta t; \\ x_j &= (j-1)H_x; \\ y_k &= (k-1)H_y, \end{aligned} \quad (4.14)$$

где Δt – интервал разбиения по времени, а H_x и H_y – интервалы разбиения по координатам x и y соответственно. Для решения уравнения (4.12) будем использовать явную разностную схему. При этом производные, входящие в уравнение, аппроксимируются следующим образом (см. рис. 4.10б):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi_{j,k}^{n+1} - \varphi_{j,k}^n}{\Delta t}, \quad (4.15)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_{j+1,k}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j-1,k}^n}{H_x^2}, \quad (4.16)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{\varphi_{j,k+1}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n}{H_y^2}. \quad (4.17)$$

При подстановке последних выражений в уравнение (4.12) получим явную разностную схему. Согласно разностному шаблону (рис. 4.10б), при наличии начальных и граничных условий (см. ниже) такая схема имеет единственную неизвестную величину $\varphi_{j,k}^{n+1}$. Выражая эту величину из разностной схемы представления уравнения (4.12), получим:

$$\begin{aligned} \varphi_{j,k}^{n+1} &= \varphi_{j,k}^n + \frac{g\delta\Delta t}{H_x^2} (\varphi_{j+1,k}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j-1,k}^n) + \frac{g\delta\Delta t}{H_y^2} (\varphi_{j,k+1}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n) - \\ &- \delta\Delta t \left(2\alpha (T - T_c) \varphi_{j,k}^n + a\varphi_{j,k}^n \varepsilon_{el}^2 - b (\varphi_{j,k}^n)^2 + c (\varphi_{j,k}^n)^3 \right) + \sqrt{\Delta t} W_{j,k}^n, \end{aligned} \quad (4.18)$$

где функция Бокса-Мюллера W^n определяется выражением (2.38).

Далее рассмотрим ситуацию, когда $H_x = H_y = H$. С учетом (2.16) уравнение (4.18) можно записать в более удобном для решения виде:

$$\begin{aligned} \varphi_{j,k}^{n+1} &= \varphi_{j,k}^n + \frac{g\delta\Delta t}{H^2} (\varphi_{j+1,k}^n + \varphi_{j,k+1}^n - 4\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n + \varphi_{j-1,k}^n) - \delta\Delta t \left(2\alpha \times \right. \\ &\times (T - T_c) \varphi_{j,k}^n + a\varphi_{j,k}^n \left(\frac{V\tau_\varepsilon}{h} \right)^2 - b (\varphi_{j,k}^n)^2 + c (\varphi_{j,k}^n)^3 \left. \right) + \sqrt{\Delta t} W_{j,k}^n. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Для численного решения уравнения (4.19) его необходимо дополнить начальными и граничными условиями, которые представляются в виде

$$\varphi_{j,k}^0 = \zeta(x_j, y_k), \quad (4.20)$$

$$\varphi_{1,k}^{n+1} = f_1(t^{n+1}, y_k), \quad (4.21)$$

$$\varphi_{N_x,k}^{n+1} = f_2(t^{n+1}, y_k), \quad (4.22)$$

$$\varphi_{j,1}^{n+1} = f_3(t^{n+1}, x_j), \quad (4.23)$$

$$\varphi_{j,N_y}^{n+1} = f_4(t^{n+1}, x_j), \quad (4.24)$$

где первое условие (4.20) представляет начальные условия на нулевом временном слое (см. рис. 4.10а), а остальные 4 условия (4.21) – (4.24) описывают значения переменной φ на границах рассматриваемой системы (см. рис. 4.10). Условия (4.20) – (4.24) выбираются из физического представления задачи.

Для адекватного выбора начальных и граничных условий рассмотрим аналог SFA (см. рис. 1.1). В этом типе экспериментов трущиеся поверхности погружены в жидкость, которая представляет смазку [274]. При этом смазочный материал при взаимном передвижении поверхностей не выдавливается из-под них даже при больших трибологических давлениях, которые обычно нужны для того, чтобы сблизить поверхности на расстояние, сравнимое с атомарными размерами, что и обеспечивает ультратонкость смазки (толщина всего в несколько атомарных диаметров, иногда исследуются и мономолекулярные слои). Поскольку свойства смазки, находящейся между поверхностями, сильно отличаются от свойств объемной жидкости, при дальнейшем моделировании будем пренебрегать краевыми эффектами. Это позволяет для численного решения системы уравнений (4.19) применить периодические граничные условия, что эквивалентно ”заворачиванию“ пространственной плоскости, показанной на рис. 4.10а в тор. Такой подход позволяет используя сравнительно небольшое количество разбиений по обоим осям рассматривать формально бесконечные системы, в которых отсутствуют краевые эффекты. При этом в соотношениях (4.19) достаточно учесть 4 условия: если $j = 1$, то $j - 1 \rightarrow N_x$; если $k = 1$, то $k - 1 \rightarrow N_y$; если $j = N_x$, то $j + 1 \rightarrow 1$; если $k = N_y$, то $k + 1 \rightarrow 1$. При этом необходимость в использова-

нии граничных условий (4.21) – (4.24) отпадает. Начальные условия мы можем выбрать произвольным образом. Пускай значения узлов пространственной сетки на нулевом временном слое $\varphi_{j,k}^0 \in [0, 1]$ и выбраны случайным образом с равномерным распределением.

Выражение (4.19) вместе с набором начальных и граничных условий (4.20) – (4.24) дает $(M + 1)N_x N_y$ уравнений¹³, что как раз равно количеству узлов пространственно-временной решетки, показанной на рис. 4.10а¹⁴. Однако, в уравнение (4.19) входит также значение скорости сдвига V , которая в процессе движения обычно не является постоянной величиной. В связи с этим для конкретизации рассмотрим механический аналог трибологической системы, представленный на рис. 1.21. Поскольку в нашем случае поверхности разбиваются пространственной сеткой, которая содержит N_x узлов по оси x и N_y – по оси y , формула для определения силы трения F (2.30) для n -того временного слоя запишется в виде

$$F = \frac{AV}{N_x N_y h} \sum_{j=1}^{N_x} \sum_{k=1}^{N_y} \left[a(\varphi_{j,k}^n)^2 \tau_\varepsilon + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h} \right)^\gamma \right]. \quad (4.25)$$

В (4.25) производится суммирование составляющих силы трения от каждой элементарной площадки площадью $A / (N_x N_y)$ (общее количество таких участков равно $N_x N_y$), в центре каждой из которых располагается узел пространственной решетки, показанной на рис. 4.10а. Теперь у нас есть все необходимые для решения условия и уравнения, и система (4.19), (2.31) может быть решена численно.

4.2.2. Результаты

Результат численного моделирования показан на рис. 4.11. На рисунке пока-

¹³В случае использования периодических граничных условий соотношения (4.21) – (4.24) заменяются таким же количеством уравнений (4.19) при $j = 1, j = N_x, k = 1, k = N_y$.

¹⁴При подсчете количества независимых уравнений следует учитывать, что $f_1(t^{n+1}, y_1) = f_3(t^{n+1}, x_1)$, $f_1(t^{n+1}, y_{N_y}) = f_4(t^{n+1}, x_1)$, $f_2(t^{n+1}, y_1) = f_3(t^{n+1}, x_{N_x})$, $f_2(t^{n+1}, y_{N_y}) = f_4(t^{n+1}, x_{N_x})$. Для соответствующих функций это видно из левых частей уравнений (4.21) – (4.24), а также непосредственно из рис. 4.10а, поскольку указанные значения лежат на вертикальных ребрах куба, являющихся общими для стыков вертикальных граней, на которых и выбираются граничные условия.

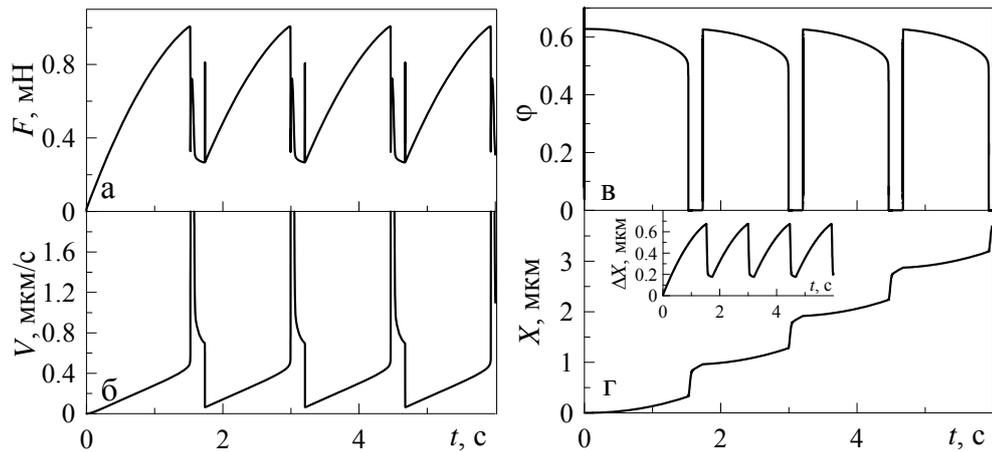


Рис. 4.11. Зависимости основных величин от времени t при параметрах средней панели рис. 2.23 и $N_x = N_y = 150$, $dt = 10^{-7}$ (10^{-8}) с, $g/H^2 = 10$ (10^4) Дж/м³.

заны временные зависимости силы трения F , скорости блока V , параметра порядка φ , натяжения пружины ΔX и координаты блока X при фиксированных параметрах модели (см. подпись к рисунку). Рисунок построен при условиях, при которых в системе устанавливается прерывистый режим движения. Механизм возникновения прерывистого режима в рассматриваемом случае аналогичен механизму, подробно описанному на рис. 2.10, где исследуется однородный случай без учета соответствующих градиентных вкладов. Несмотря на то, что в случае, показанном на рис. 4.11, проводится учет пространственной неоднородности, результаты показывают, что устанавливающийся режим представляет периодический режим прерывистого трения. Из зависимости $\varphi(t)$ видно, что когда смазка расплавлена ($\varphi \approx 0$), скорость движения блока существенно увеличивается, за счет чего он за сравнительно малый промежуток времени проскальзывает на существенное расстояние (см. зависимость $X(t)$). Отметим, что при численном решении системы уравнений параметр φ определяется отдельно для каждой из $N_x \times N_y = 150 \times 150 = 22500$ элементарных площадок. Программно рассматривается двумерный массив, содержащий такое же количество элементов — значений $\varphi_{j,k}$, которые постоянно пересчитываются согласно приведенной выше итерационной процедуре. В связи с этим на рисунке $\varphi(t)$ приведена временная зависимость параметра порядка, который для каждого момента времени представляет случайным образом выбранный элемент массива (всего 22500 элемен-

тов). Зависимость $\varphi(t)$ визуально является гладкой и непрерывной, что свидетельствует о том, что все элементы массива принимают близкие значения. Однако, начальные условия выбирались случайным образом, из чего следует, что смазочный слой после быстрой релаксации приобретает однородную структуру (характеризуется практически одинаковыми значениями φ по плоскости временного слоя). Причем релаксация к однородному состоянию при выбранных начальных условиях осуществляется настолько быстро, что режим движения стационарен уже при малых начальных временах (зависимости на рис. 4.11 являются периодическими, без видимого переходного режима). Когда же параметр $\varphi_{j,k}$ во всех точках пространственной сетки принимает одинаковые значения, градиентный вклад нивелируется (см. выражение в скобках при $g\delta\Delta t/H^2$ в расчетной формуле (4.19)). Отметим, что уравнения решались при различных значениях отношения g/H^2 (от 10 Дж/м^3 до 10^4 Дж/м^3). При этом расчеты показали, что получаемые зависимости при различных g/H^2 из указанного диапазона в точности повторяют приведенные на рис. 4.11. Причем при выборе значения g/H^2 следует правильным образом выбирать шаг интегрирования по времени dt . Это связано с тем, что используемая для решения уравнений явная разностная схема (4.19) является условно устойчивой, и требует уменьшения шага интегрирования dt при увеличении параметра g/H^2 . Например, в случае, если уравнения (4.19) не содержат вторую скобку при $\delta\Delta t$ (обычное уравнение теплопроводности), условие устойчивости итерационной процедуры запишется как [273]

$$\Delta t \leq \frac{H^2}{4g\delta}, \quad (4.26)$$

что при $g/H^2 = 10 \text{ Дж/м}^3$ дает условие $dt \leq 2,5 \cdot 10^{-4} \text{ с}$, а при $g/H^2 = 10^4 \text{ Дж/м}^3$ приводит к значению $dt \leq 2,5 \cdot 10^{-7} \text{ с}$. Поэтому, как это следует из подписи к рис. 4.11, для численного решения уравнений в зависимости от параметров выбиралось два значения dt (либо 10^{-7} с , либо 10^{-8} с).

На рис. 4.11 приведена зависимость значения параметра порядка φ от времени t . Из нее видно, что плавление и затвердевание происходит резко, по механизму фазового перехода первого рода. На рис. 4.12 допол-

нительно показаны зависимости величины φ от скорости сдвига V . Причем кривая 2 здесь соответствует выражению (2.48). На указанной зависимости реализуется гистерезис, т.е. смазка плавится и затвердевает при различных значениях скорости сдвига, поскольку потенциал (2.46) соответствует реализации в системе фазового перехода первого рода.

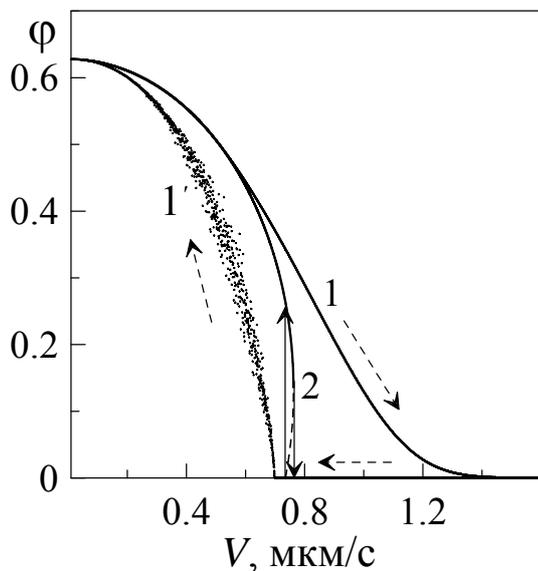


Рис. 4.12. Зависимость значения параметра порядка φ (безразмерная величина) от скорости сдвига V . Кривая 2 получена по формуле (2.48), кривые 1 и 1' соответствует рис. 4.11. Стрелками показано направление изменения параметров во времени.

Кривые 1 и 1' соответствуют рис. 4.11. Эти зависимости состоят из точек, и на них приведены все значения φ , показанные на рис. 4.11, для всех циклов плавление/затвердевание. Кривая 1, отвечающая плавлению смазочного материала, является гладкой, что очередной раз подтверждает периодичность зависимостей, приведенных на рис. 4.11. Зависимость $\varphi(V)$, показанная кривой 1', свидетельствует о том, что в процессе затвердевания параметр порядка φ принимает различные (близкие по величине) значения по площади контакта. Но это не нарушает периодичность зависимостей, приведенных на рис. 4.11, поскольку процесс затвердевания происходит довольно быстро, после чего параметр порядка снова

принимает одинаковые значения по площади контакта. Кривые, показанные на рис. 4.12, совпадают только при малых скоростях сдвига V . Это связано с тем, что хотя кривая 2 и показывает резкое уменьшение параметра φ до нуля при плавлении, в действительности этого не происходит, поскольку после удовлетворения условий плавления ($T > T_{c0}$ (2.50) или $V > V_{c0}$ (2.51)) происходит процесс непрерывной релаксации параметра порядка φ к нулевому значению, а за это время за счет снижения силы трения F трущийся блок успевает разогнаться до существенных скоростей V . Из зависимостей $V(t)$ и $\varphi(t)$, приведенных на рис. 4.11, следует, что параметр φ после плавления принимает ненулевое значение, показанное

на рис. 4.12, при больших скоростях сдвига V (приблизительно $V > 0,5$ мкм/с) довольно малый промежуток времени, что говорит о быстром процессе релаксации. Однако, варьированием кинетического коэффициента δ можно описать и обратную ситуацию, когда релаксация параметра порядка к стационарному значению происходит медленно, что влияет на поведение системы критическим образом, что было показано на рис. 3.18.

Таким образом, влияние пространственной неоднородности хотя и прослеживается (см. рис. 4.12), оно в рассматриваемом случае не приводит к изменению наблюдаемого поведения трибологической системы, поскольку кинетические зависимости основных величин, показанные на рис. 2.23, визуальнo не изменяются. Однако, при существенном увеличении времени релаксации параметра порядка (уменьшении значения кинетического коэффициента δ) следует ожидать, что влияние пространственной неоднородности будет критическим образом влиять на кинетику системы. Рассмотрение этого объемного вопроса выходит за рамки настоящей диссертационной работы.

4.3. Учет упругости контактирующих тел в режиме граничного трения

Во многих прикладных трибологических задачах упругие свойства контактирующих материалов играют определяющую роль [263, 275]. Однако, в предыдущих главах диссертации рассматривались модели, в которых контактирующие тела считались несжимаемыми, а их упругие свойства не учитывались. В случае, когда жесткость поверхностей трения намного больше, чем аналогичный параметр для смазки, такое приближение вполне оправдано. Однако, во избежание указанного ограничения, проведем здесь моделирование контакта между трущимися поверхностями, разделенных граничной смазкой, с учетом упругих свойств контактирующих материалов.

4.3.1. Формулировка задачи и процедура расчета

Рассмотрим трибологическую систему, показанную на рис. 4.13. На рисунке

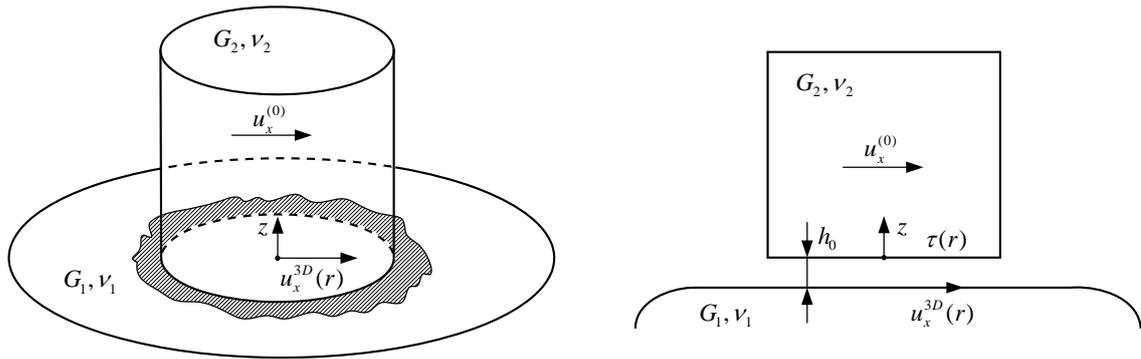


Рис. 4.13. Геометрическая конфигурация исследуемой системы. Цилиндрический индентор радиусом a_0 , выполненный из материала с модулем сдвига G_2 и коэффициентом Пуассона ν_2 , находится на плоскости с параметрами G_1, ν_1 и отделен от нее граничным слоем смазочного материала толщиной h .

изображена система, состоящая из индентора с круговым сечением радиуса a_0 , отделенного от нижней поверхности смазочным слоем толщиной h . Поверхности контактирующих тел полагаются абсолютно гладкими, а смазочный слой ультратонким. Это позволяет для описания рассматриваемой системы использовать идеологию, развитую в предыдущих разделах диссертационной работы. Задача контакта двух упругих тел, которые характеризуются сдвиговыми модулями G_1, G_2 и коэффициентами Пуассона ν_1, ν_2 , может быть сведена к задаче контакта несжимаемого цилиндрического индентора с упругим полупространством с эффективным модулем сдвига [27, 28]:

$$G^* = \left(\frac{2 - \nu_1}{4G_1} + \frac{2 - \nu_2}{4G_2} \right)^{-1}. \quad (4.27)$$

В работах [276, 277] показано, что выражение справедливо также и для шероховатых поверхностей, поэтому при необходимости проведенное далее исследование может быть обобщено.

Пусть показанное на рис. 4.13 верхнее (несжимаемое) тело сдвигается как единое целое, обозначим его сдвиг как $u_x^{(0)}$. Поскольку нижнее тело обладает упругостью [278], его "сдвиг" можно описать соответствующим трехмерным распределением $u_x^{(3D)}(r)$, которое является функцией радиальной координаты r . В этом случае локальные упругие деформации в смазочном слое также будут функ-

цией радиуса:

$$\varepsilon(r) = \frac{u_x^{(0)} - u_x^{(3D)}(r)}{h}. \quad (4.28)$$

Если нам известно распределение деформаций $\varepsilon(r)$ и параметра порядка $\varphi(r)$, легко определить распределение упругих напряжений $\tau(r)$ в смазочном слое (ср. с (2.5)):

$$\tau(r) = a\varepsilon_{el}(r) [\varphi(r)]^2, \quad (4.29)$$

где упругая деформация $\varepsilon_{el}(r)$ определяется полной деформацией $\varepsilon(r)$ и ее пластической компонентой $\varepsilon_{pl}(r)$ согласно соотношению (ср. с (2.13)):

$$\varepsilon_{el}(r) = \varepsilon(r) - \varepsilon_{pl}(r). \quad (4.30)$$

Согласно методу редукции размерности (Method of Dimensionality Reduction – MDR), оригинальная трехмерная задача (3D), определяемая координатой r , может быть сведена к эквивалентному одномерному представлению (1D), в зависимости от координаты x [25–28]. Затем, после произведения всех необходимых вычислений, по найденным одномерным распределениям можно восстановить точное трехмерное решение. Согласно стандартной MDR процедуре [25], из трехмерного распределения напряжений $\tau(r)$ можно получить одномерное распределение плотности силы, используя соответствующее интегральное преобразование:

$$q(x) = 2 \int_x^{a_0} \frac{r\tau(r) dr}{\sqrt{r^2 - x^2}}. \quad (4.31)$$

Далее, имея известное распределение $q(x)$, найдем одномерное распределение перемещений $u_x^{(1D)}(x)$:

$$u_x^{(1D)}(x) = \frac{q(x)}{G^*}. \quad (4.32)$$

Обратная операция

$$u_x^{(3D)}(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^r \frac{u_x^{(1D)}(x) dx}{\sqrt{r^2 - x^2}} \quad (4.33)$$

восстанавливает трехмерное распределение $u_x^{(3D)}(r)$, этим самым замыкая цикл вычислений. Действующая сила трения F_x может быть найдена как из одномер-

ного, так и из трехмерного распределений:

$$F_x = 2 \int_0^{a_0} q(x) dx = 2\pi \int_0^{a_0} \tau(r) r dr. \quad (4.34)$$

Далее показано, что оба определения в (4.34) дают один и тот же результат. Проведем моделирование кинетики системы, показанной на рис. 4.13, с учетом процедуры, описанной уравнениями (4.28) – (4.34). Рассмотрим случай фазового перехода первого рода, соответствующий потенциалу (2.46). На рис. 4.14 показаны зависимости стационарных значений параметра порядка φ_0 и упругих напряжений τ от упругих деформаций ε_{el} при параметрах, удовлетворяющих нормировочному условию (2.49). На рис. 4.14а наблюдаются особенности, подробно описан-

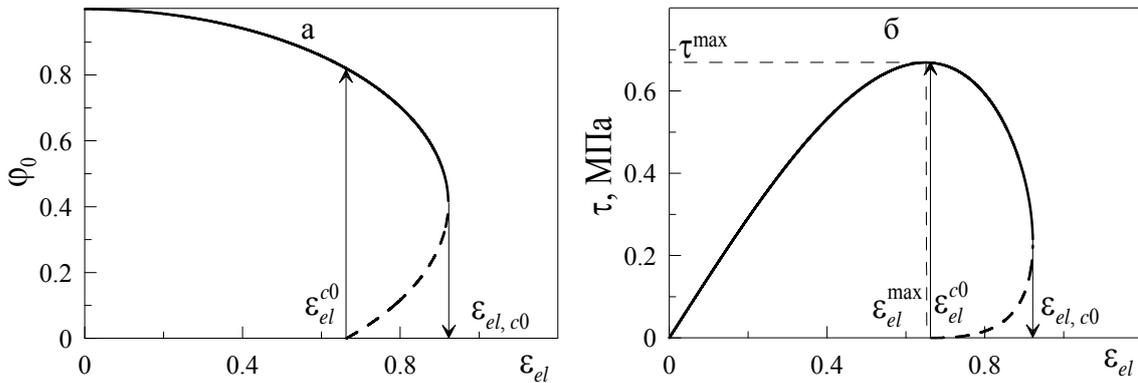


Рис. 4.14. Стационарные значения параметра порядка φ_0 (2.48) (а) и упругих сдвиговых напряжений τ (2.5) (б), как функции упругих деформаций ε_{el} при параметрах $\alpha (T - T_c) = -3,3 \cdot 10^5$ Дж/м³, $a = 1,5 \cdot 10^6$ Па, $b = 3 \cdot 10^6$ Дж/м³, $c = 3,66 \cdot 10^6$ Дж/м³.

ные ранее (см. рис. 2.20). На рисунке наблюдается плавление смазочного материала ($\varphi_0 = 0$) при выполнении условия (ср. с (2.51))

$$\varepsilon_{el} > \varepsilon_{el,c0} = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{4ac}}, \quad (4.35)$$

а затвердевает смазка ($\varphi_0 \neq 0$), если упругие сдвиговые деформации становятся меньше значения (ср. с (2.25))

$$\varepsilon_{el} < \varepsilon_{el}^{c0} = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}. \quad (4.36)$$

На рис. 4.14б показана зависимость упругих напряжений $\tau(\varepsilon_{el})$. Здесь, как и на рис. 4.14а, плавление ($\tau = 0$) осуществляется при выполнении условия (4.35),

а затвердевание ($\tau \neq 0$) – при удовлетворении (4.36). Функция $\tau(\varepsilon_{el})$ имеет максимум τ^{\max} в точке $\varepsilon_{el} = \varepsilon_{el}^{\max}$:

$$\varepsilon_{el}^{\max} = \frac{1}{12} \sqrt{\frac{10b^2}{ac} - \frac{96\alpha(T - T_c)}{a}} + \frac{2b}{a} \sqrt{\frac{25b^2}{c^2} - \frac{192\alpha(T - T_c)}{c}}. \quad (4.37)$$

Значению ε_{el}^{\max} (4.37) соответствуют максимальные упругие напряжения τ^{\max} :

$$\tau^{\max} = a\varepsilon_{el}^{\max} \left(\frac{b}{2c} + \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{c}(\varepsilon_{el}^{\max})^2 + \frac{2\alpha(T - T_c)}{c}\right)} \right)^2. \quad (4.38)$$

При численном моделировании дополнительно будем учитывать градиентный вклад, используя методику, описанную в подразделе 4.2 диссертации. В рассматриваемом случае итерационная процедура согласно (4.11) запишется в виде (ср. с (4.12))

$$\begin{aligned} \varphi(r_i) := & \varphi(r_i) - \varphi(r_i) \left(2\alpha(T - T_c) + a(\varepsilon_{el}(r_i))^2 - b\varphi(r_i) + c\varphi(r_i)^2 \right) \delta\Delta t + \\ & + g\delta\Delta t \nabla^2 \varphi(r_i) + \sqrt{\Delta t} W_n. \end{aligned} \quad (4.39)$$

В случае цилиндрической симметрии задачи (см. рис. 4.13) оператор Лапласа в полярных координатах сводится к форме [217]

$$\nabla^2 \varphi(r) = \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2}. \quad (4.40)$$

При численном моделировании координаты x и r делятся на N сегментов каждая, после чего интегралы (4.31), (4.33) и (4.34) заменяются соответствующими суммами. Все рассчитываемые распределения, зависящие от радиуса r (или координаты x), определяются в точках $r_i = ia_0/N$ ($x_i = ia_0/N$), где $i \in [0, N - 1]$. В наших расчетах выбирались значения $\Delta t = 10^{-8}$ с, $N = 1000$. Также выбирались начальные распределения

$$u_x^0(r) = \text{const} = 0, \quad (4.41)$$

$$u_x^{(3D)}(r) = \text{const} = 0, \quad (4.42)$$

$$\varphi(r) = \text{const} = \varphi_+ = \frac{b}{2c} + \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \frac{2\alpha(T - T_c)}{c}}, \quad (4.43)$$

где φ_+ – равновесное значение параметра порядка, соответствующее нулевым деформациям (тождественно равно значению φ_+ (2.48) при $\varepsilon_{el} = 0$). Начиная с начальных значений распределений (4.41) – (4.43), будем циклически повторять описанную выше процедуру (4.31) – (4.34), на каждом временном шаге определяя при этом напряжения $\tau(r)$ и параметр порядка $\varphi(r)$ согласно (4.29) и (4.39). Это позволит найти временную эволюцию распределений $\varepsilon(r)$ и $\varphi(r)$, а также интересующую нас зависимость силы трения $F_x(t)$ (4.34).

4.3.2. Результаты моделирования

Рассмотрим движение цилиндрического индентора, показанного на рис. 4.13, с постоянной скоростью V_0 :

$$u_x^{(0)} = V_0 t. \quad (4.44)$$

В результате моделирования мы обнаружили, что на поведение системы критическим образом влияет величина кинетического коэффициента δ . Показанные на рис. 4.15 зависимости рассчитаны при значении $\delta = 1 \text{ (Па}\cdot\text{с)}^{-1}$. При пара-

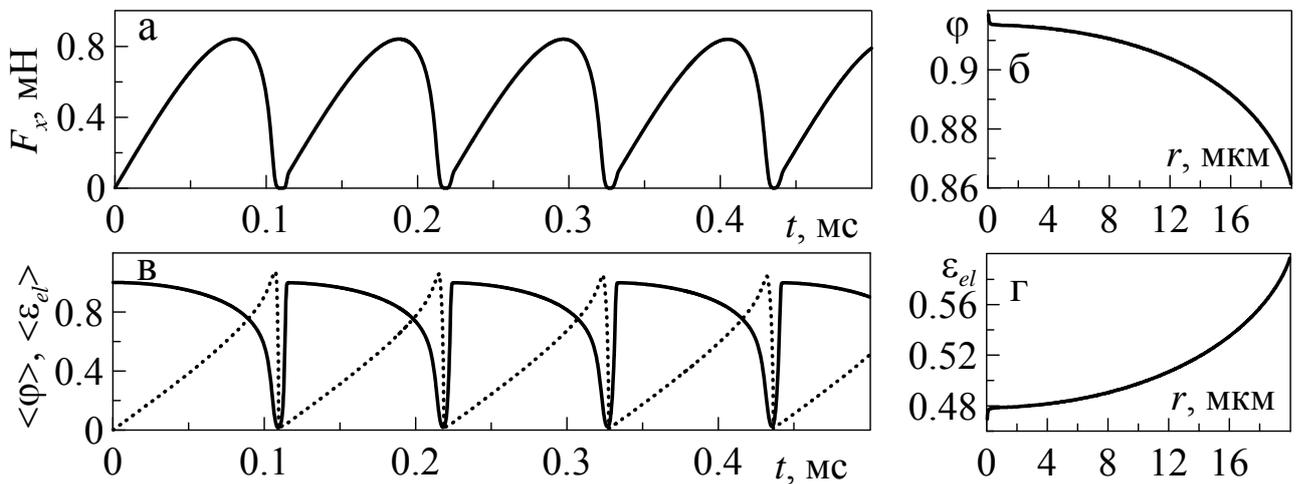


Рис. 4.15. (а) зависимость силы трения $F_x(t)$, полученная при параметрах рис. 4.14 и $h = 10^{-7}$ м, $a_0 = 2 \cdot 10^{-5}$ м, $G^* = 10^9$ Па, $T = 280$ К, $g = 10^{-6}$ Дж/м, $V_0 = 10^{-3}$ м/с, $\delta = 1 \text{ (Па}\cdot\text{с)}^{-1}$; (б) распределение $\varphi(r)$ в конечный момент расчета; (в) среднее значение $\langle \varphi \rangle$ (сплошная линия) и $\langle \varepsilon_{el} \rangle$ (пунктирная линия); (г) распределение $\varepsilon_{el}(r)$ в конечный момент расчета.

метрах рис. 4.15 макроскопическое движение индентора имеет прерывистый характер (*stick-slip*). Отметим, что увеличение сдвиговой скорости V_0 приводит к

увеличению частоты *stick-slip* переходов, как это было показано на рис. 2.11а. На рис. 4.15б и рис. 4.15г видно, что процесс плавления распространяется от границы системы к центру.

Важным аспектом численной процедуры является корректный расчет упругих деформаций согласно выражению (4.30). С увеличением значения параметра $u_x^{(0)}$ согласно (4.44) полная деформация в смазочном слое в соответствии с (4.28) нарастает монотонно. Тем не менее, для расчета упругих напряжений (4.29) необходимо отдельно определять упругую компоненту деформации (4.30). Рассмотрим этот вопрос более подробно. Первоначально при нулевом смещении $u_x^{(0)} = 0$ деформации в слое равны нулю, и увеличиваются со временем. Поскольку смазочный слой изначально находится в твердоподобном состоянии, мы предполагаем, что после начала движения общая деформация равна упругой вплоть до точки плавления, когда $\varphi(r_i) \rightarrow 0$. В численных расчетах мы не можем использовать условие $\varphi(r_i) \rightarrow 0$. В связи с этим будем считать, что смазка расплавилась, если $\varphi(r_i) < 0,01$, что существенно меньше равновесного значения φ_0 в твердоподобном состоянии.

Когда система достигнет указанного выше порога в локальной точке r_i , происходит плавление, и значение $u_x^{(0)}(r_i)$ в этой точке принимается равным нулю. При этом условие (4.30) удовлетворяется автоматически. После такого сброса величины $u_x^{(0)}(r_i)$ снова начинается ее рост, вплоть до момента следующего плавления, и так далее. Во всех рассмотренных случаях плавление начинается на границе контакта и распространяется к центру. Кроме того, в то время как фронт плавления распространяется внутрь, участки, которые находятся ближе к краю контакта, при этом уже начинают повторно затвердевать.

На рис. 4.16 показаны фронты плавления и рекристаллизации для нескольких значений радиуса системы r . В обоих случаях видно изменение параметра порядка с вариацией радиуса. Также на рисунке видно распространение плавления от границы системы к центру контакта, причем рекристаллизация протекает в том же самом направлении.

Нами проведены аналогичные расчеты для модели фазового перехода второ-

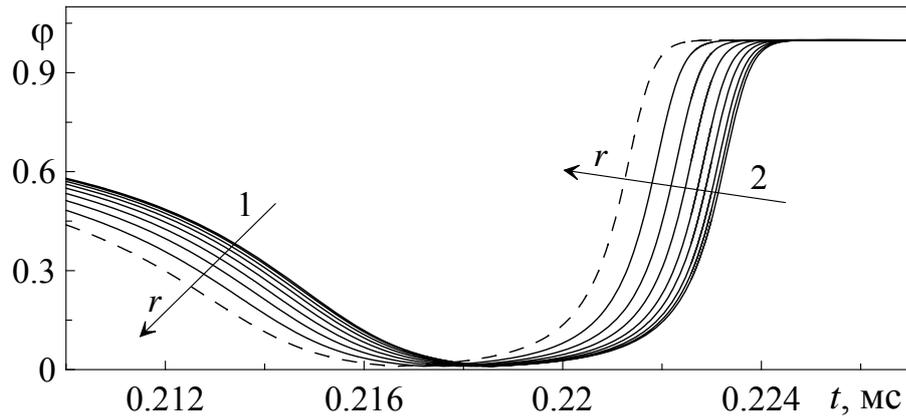


Рис. 4.16. Зависящие от времени фронты плавления (стрелка 1) и рекристаллизации (стрелка 2), соответствующие рис. 4.15. Стрелки показывают направления распространения фронтов вдоль пространственной координаты r .

го рода. Полученные результаты показывают, что при видимом отличии в получаемых пространственных распределениях величин макроскопическая реакция системы "размазана" таким образом, что временные зависимости силы трения и средних значений напряжений и параметра порядка аналогичны наблюдаемым при фазовом переходе первого рода. Однако, в случае фазового перехода первого рода из-за наличия барьера между двумя стационарными состояниями, кинетика системы критическим образом зависит от величины кинетического параметра δ , который задает скорость плавления и затвердевания. Указанное различие может быть даже более выраженным. К примеру, для более реалистичных условий, реализуемых в SFA экспериментах, в которых между движущимся блоком и движимым устройством всегда есть пружина (см. рис. 1.21), реализуется более сложное динамическое поведение. Напомним, что предлагаемое в этом подразделе диссертации исследование проводится для случая движения верхней трущейся поверхности с постоянной сдвиговой скоростью V_0 .

На рис. 4.17 показаны временные зависимости силы трения для величины $\delta = 0,07 \text{ (Па}\cdot\text{с)}^{-1}$. Первый пик зависимости $F_x(t)$ здесь гораздо выше, чем последующие. Причина этого кроется в том, что после первого акта плавления возможным становится только частичное затвердевание смазочного материала. Другими словами, после первого плавления среднее значение параметра порядка $\langle \varphi \rangle$ снова начинает расти, однако достигает существенно меньшего ненуле-

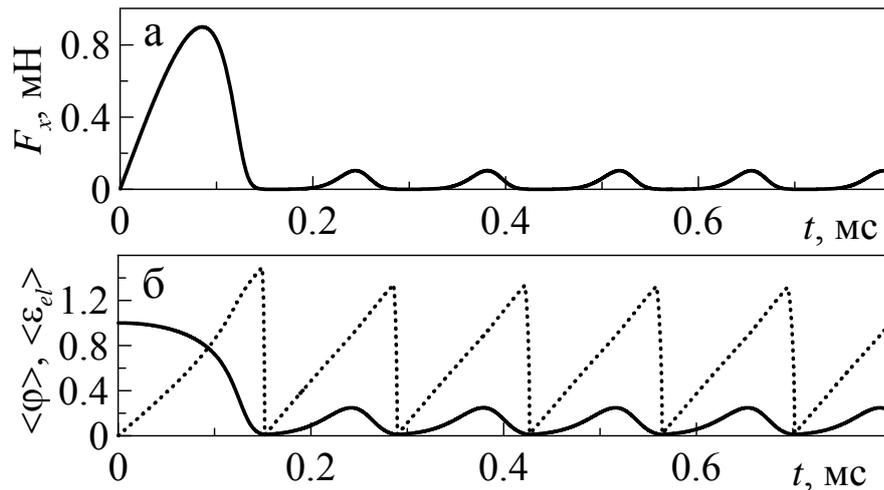


Рис. 4.17. Зависимости силы трения $F_x(t)$ и средних величин $\langle \varphi \rangle$, $\langle \varepsilon_{el} \rangle$, рассчитанные при параметрах рис. 4.15 и $\delta = 0,07 \text{ (Па}\cdot\text{с)}^{-1}$.

вого значения, чем соответствующее твердоподобному состоянию в режиме покоя, в связи с чем также наблюдается малое значение модуля сдвига μ . Такое поведение действительно наблюдается во многих экспериментах [12]. Качественно оно может быть описано следующим образом. Как правило, времена релаксации для заключенных между твердыми телами ультратонких смазочных материалов на порядки больше соответствующих времен для объемных смазок. Из-за этого для полного затвердевания таких систем требуется достаточно длительное время. Обычно в эксперименте, перед началом движения, система остается в состоянии покоя в течение времени, которое достаточно для достижения параметром порядка значения, близкого к равновесному. В результате, перед первым актом плавления наблюдается самое большое значение силы трения F_x . При дальнейшем движении из-за медленной релаксации параметра порядка при малых значениях кинетического коэффициента δ , в системе возникают сверхкритические значения напряжения сдвига (достаточные для плавления) задолго до момента, когда наблюдается полное затвердевание смазочного материала.

Сказанное выше означает, что при движении с постоянной скоростью V_0 система никогда не будет иметь достаточно времени, чтобы смазка приобрела упорядоченную структуру, близкую к равновесному состоянию. Если скорость скольжения станет равной нулю, система со временем снова вернется в исходное

состояние, и после возобновления движения снова продемонстрируют высокий пик силы трения $F_x(t)$. Описанное поведение показано на рис. 1.9 литературного обзора (раздел 1 диссертации).

Математически описанное поведение при фазовом переходе первого рода является потому, что нулевой минимум потенциала (2.46) отделен от ненулевого максимумом (см. рис. 2.19 и вставку к нему). При малых значениях кинетического параметра δ , после первого акта плавления параметр порядка φ возрастает настолько медленно, что упругая деформация ε_{el} имеет достаточно времени для достижения величины, при которой снова наблюдается уменьшение параметра порядка φ . В связи с этим, можно ожидать наличия некоторого критического значения параметра δ , которое будет разделять режим, показанный на рис. 4.17 от "стандартного" (см. рис. 4.15). Указанное критическое значение при фиксированных параметрах системы можно найти в результате набора численных экспериментов с последовательным изменением значения параметра δ .

4.3.3. Влияние температуры

Проведем исследование влияния температуры смазочного слоя T на кинетику системы. Согласно уравнениям (2.46), (4.39) только коэффициент $\alpha(T - T_c)$ зависит от температуры. Поэтому изменение значений этого коэффициента можно интерпретировать как изменения температуры T . На рис. 4.18 показаны кинетические зависимости исследуемых величин при изменении указанного коэффициента согласно закону

$$\alpha(T - T_c) = -3,3 \cdot 10^5 \exp(-10^4 t), \quad (4.45)$$

что при нулевых деформациях $\varepsilon_{el} = 0$ соответствует твердоподобному состоянию смазочного материала. Экспоненциальная зависимость (4.45) воспроизводит нагрев смазочного материала за счет теплообмена с окружающей средой. На рис. 4.18 видно, что повышение температуры приводит к уменьшению силы трения F_x . Вставки, на которых ординаты показаны в логарифмической шкале, показывают, что режим прерывистого трения существует даже при очень малых

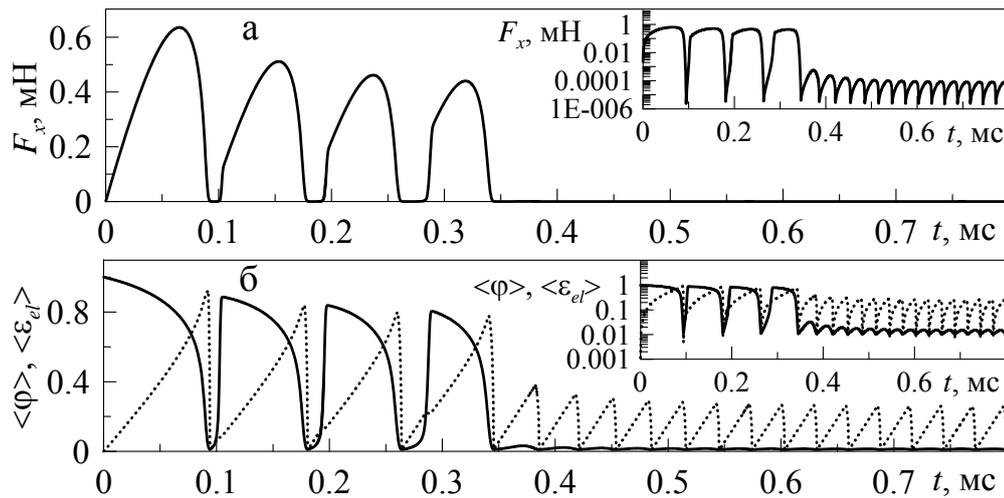


Рис. 4.18. Зависимости силы трения $F_x(t)$ (а) и средних величин $\langle \varphi \rangle$, $\langle \varepsilon_{el} \rangle$ (б), рассчитанные при параметрах рис. 4.15 и последовательном снижении температуры согласно выражению (4.45). На вставках к рисункам показаны их полные копии, где ординаты приведены в логарифмическом масштабе.

значениях коэффициента (4.45), однако сила трения F_x при этом принимает чрезвычайно малые значения. В показанном пределе температура очень близка к критической, параметр порядка близок к нулю, а смазка остается практически все время в жидком состоянии. Отметим, что в рассматриваемом случае учитывается только упругая компонента силы трения F_x . В связи с этим, после плавления, сила трения принимает очень малые значения. Тем не менее, в реальных системах, как это рассмотрено выше, сила трения всегда имеет вязкую составляющую, которая, конечно, не равна нулю в жидком состоянии [12].

4.4. Метод наноструктурирующего выглаживания как способ получения упрочненных поверхностей с микроразмерными неровностями

Атомарно-гладкие поверхности, контакт между которыми рассматривается в данной работе, получают многими методами. Это могут быть поверхности, полученные из монокристаллов механическим способом при сколе вдоль атомной плоскости [87], либо химическим путем [279]. Поверхности, имеющие микроразмерные неровности, можно получать также в рамках многих методов. Один из них — это метод наноструктурирующего выглаживания [30, 63, 269, 270], кото-

рый в последние годы принимает все большую актуальность в различных инженерных приложениях. Метод позволяет создать в поверхностном слое обрабатываемой детали интенсивные пластические деформации (ИПД), приводящие к фрагментации поверхностного слоя и изменению его свойств. В частности, многократно повышается твердость и пластичность обработанной поверхности [280]. Выглаживание является довольно перспективным методом, поскольку применяется для модификации поверхностей макроскопических трущихся деталей. Метод заключается в циклическом воздействии на поверхность детали твердым индентором. Необходимое количество циклов воздействия задается параметрами, которые необходимо получить. При каждом цикле ИПД образовавшиеся в предыдущем цикле микро- и нанозерна будут дробиться вплоть до определенного минимального значения, которому соответствует минимум эффективного потенциала [281]. Это значение задается температурой, уровнем упругих деформаций, скоростью выглаживания v_b и непосредственно параметрами материала. Многочисленные эксперименты показывают, что существует несколько основных режимов выглаживания. Предпочтительным является стационарный режим, в котором после обработки поверхность детали представляет гладкую упрочненную структуру. Возможен также режим затухающих колебаний, в котором поверхность детали является волнистой в начале процесса и выравнивается к концу. Однако при определенных условиях возникает режим автоколебаний, когда поверхность обработанной детали представляет периодическую гребенчатую структуру. Особенности такого режима вызывают повышенный интерес, поскольку именно он приводит к порче дорогостоящих деталей и повышенному износу выглаживающего оборудования. С помощью выглаживания невозможно получить атомарно-гладкие поверхности. Однако, при трении таких поверхностей в зоне контакта будут наблюдаться области, в которых смазка или отсутствует вовсе, или имеет толщину порядка нескольких нанометров, т.е. местами будет реализоваться режим граничного трения. Рассмотрим в этом подразделе динамическую модель, позволяющую получить вид поверхностей после выглаживания.

4.4.1. Модель

На рис. 4.19 схематически показана система для обеспечения процесса наноструктурирующего выглаживания. Здесь неподвижный в направлении оси x индентор массой m скользит по поверхности вращающегося цилиндра. Относительная скорость передвижения поверхности индентора и цилиндра равна v_b .

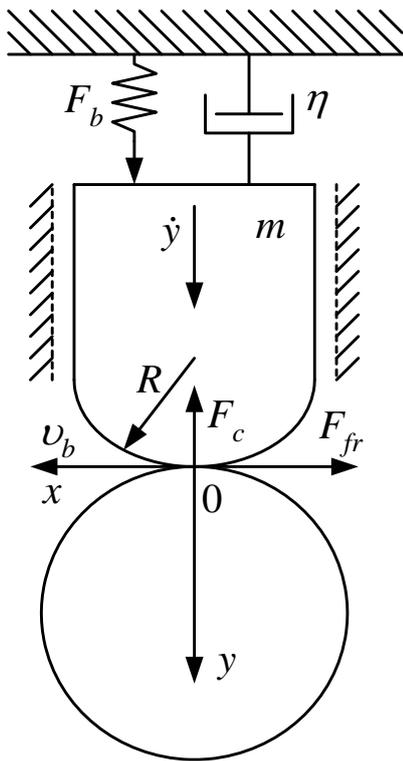


Рис. 4.19. Схематическое изображение динамической модели наноструктурирующего выглаживания [270].

Индентор находится в направляющих (показаны справа и слева на рис. 4.19 штриховыми линиями), которые при движении не позволяют ему смещаться в направлении оси x .

Рассмотрим общий случай, в котором индентор и обрабатываемая деталь изготовлены из различных материалов. На практике используется как раз такая ситуация, поскольку индентор должен быть существенно тверже, чем обрабатываемая поверхность. В частности, широкое применение нашли инденторы с алмазными наконечниками. Пускай индентор изготовлен из материала с коэффициентом

Технологически установка создана таким образом, что индентор прижимается к цилиндру с фиксированной силой F_b . При движении индентор оставляет за собой в материале пластический след. В процессе обработки индентор непрерывно сдвигается от одного края цилиндра к другому, таким образом многократно проходя по всей его поверхности. При движении индентора возникает сила трения F_{fr} , зависящая от свойств контактирующих материалов, за счет которой поверхность в процессе обработки может существенно разогреваться. На рисунке также присутствует демпфер с коэффициентом вязкого демпфирования η , играющий значительную роль подавления колебаний. При контакте индентора с выглаживаемой поверхностью со стороны материала возникает сила реакции F_c . Поверхность индентора в области контакта имеет радиус кривизны

том Пуассона ν_1 и модулем упругости E_1 , а обрабатываемый материал характеризуется параметрами ν_2 и E_2 . Тогда рассматриваемая задача может быть сведена к контакту абсолютно несжимаемого индентора с телом, имеющим эффективный модуль упругости E^* (ср. с (4.27)) [27, 28]:

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2}. \quad (4.46)$$

В описанном случае можно записать уравнение движения индентора в вертикальной плоскости в виде

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} + \eta \frac{dy}{dt} = F_b - F_c. \quad (4.47)$$

В уравнении (4.47) мы пренебрегаем силой трения в направляющих индентора. В последнем уравнении главной задачей является определение зависимости $F_c(y)$. При отрыве индентора от поверхности $F_c = 0$, а в случае контакта можно воспользоваться стандартными соотношениями контактной механики [3]:

$$F_c = 2aE^*d_{el}; \quad (4.48)$$

$$a \approx \sqrt{R(d_{pl} + d_{el})}; \quad (4.49)$$

$$F_c = \pi a_{pl}^2 \sigma_c; \quad (4.50)$$

$$a_{pl} = \sqrt{Rd_{pl}}, \quad (4.51)$$

где a — радиус области контакта; a_{pl} — радиус области контакта, связанный с пластической деформацией; σ_c — твердость материала; R — радиус индентора (см. рис. 4.19); d_{pl} и d_{el} — глубина пластического и упругого вдавливания индентора в материал. После прохождения индентора он оставляет после себя пластический след глубиной d_{pl} .

Соотношения (4.48)–(4.51) дают зависимость контактной силы F_c от глубины вдавливания $d = d_{el} + d_{pl}$ в виде

$$F_c = \frac{2\pi R\sigma_c E^* d \sqrt{Rd}}{\pi R\sigma_c + 2E^* \sqrt{Rd}}. \quad (4.52)$$

Зная явный вид зависимости для силы F_c (4.52), легко определить контактную жесткость:

$$K = \frac{\partial F_c}{\partial d} = \frac{\pi R^2 \sigma_c E^* d (3\pi R\sigma_c + 4E^* \sqrt{Rd})}{(\pi R\sigma_c + 2E^* \sqrt{Rd})^2 \sqrt{Rd}}. \quad (4.53)$$

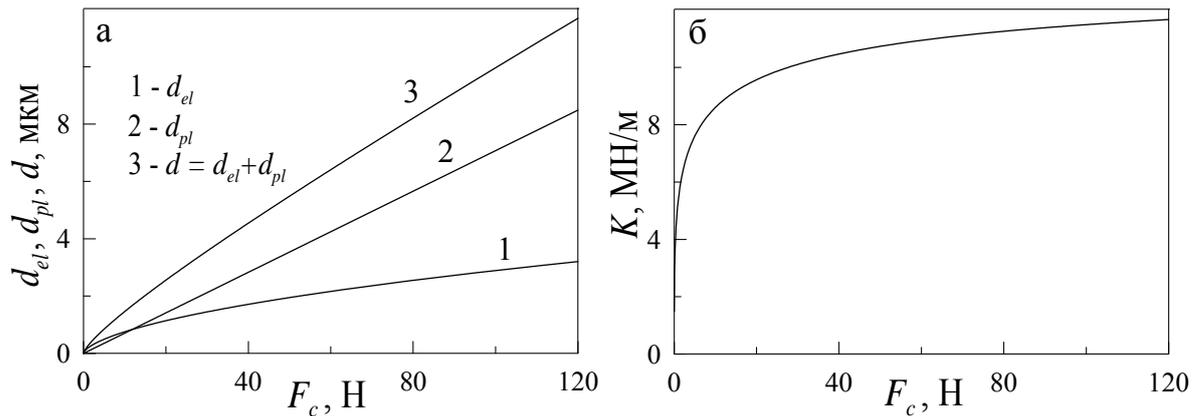


Рис. 4.20. (а) зависимость глубины пластического d_{pl} и упругого d_{el} вдавливания, а также полная глубина вдавливания d как функция контактной силы реакции F_c при параметрах $R = 0,003$ м, $\sigma_c = 1,5 \cdot 10^9$ Па, $E^* = 10^{11}$ Па; (б) зависимость контактной жесткости K (4.53) от контактной силы F_c (4.52).

Зависимости (4.48)–(4.53) показаны на рис. 4.20, на котором видно, что на начальном этапе нагружения преобладает упругая компонента напряжений, а при превышении силой критического значения

$$F_c^c = \frac{\pi^3 R^2 \sigma_c^3}{8(E^*)^2} \quad (4.54)$$

преобладающей становится пластическая компонента. Причем при контактной силе $F_c = F_c^c$ выполняется условие

$$d_{el} = d_{pl} = \frac{F_c^c}{\pi R \sigma_c} = \frac{\pi^2 R \sigma_c^2}{8(E^*)^2}. \quad (4.55)$$

Рассмотрим подробно первое прохождение индентора вдоль цилиндра. Пусть изначально поверхность цилиндра гладкая, что согласно рис. 4.20 при движении цилиндра в области его контакта с индентором соответствует координате $y = 0$. Поэтому при первом прохождении при выполнении условия $y > 0$ мы наблюдаем вдавливание индентора в поверхность и при этом выполняется тождество $y \equiv d_{el} + d_{pl}$. Таким образом, при подстановке выражения для силы (4.52) в уравнение (4.47) оно превращается в уравнение с одним неизвестным y и при известных начальных условиях может быть решено численно.

При этом для первого прохождения на каждом шаге интегрирования уравнения (4.47) воспользовавшись соотношениями (4.48)–(4.51) при $y > 0$ можно от-

дельно определить значения d_{pl} и d_{el} :

$$d_{pl} = \frac{F_c}{\pi R \sigma_c}; \quad d_{el} = y - d_{pl} = \frac{F_c}{2E^* \sqrt{Ry}}. \quad (4.56)$$

В случае $y < 0$ (приподнятие индентора над поверхностью детали) имеем $d_{pl} = d_{el} = 0$. Таким образом, после решения уравнения (4.47) получим временные зависимости $y(t)$, $d_{el}(t)$, $d_{pl}(t)$. При известном значении линейной скорости выглаживания v_b будем иметь координатную зависимость пластического следа $d_{pl}(x)$, оставленного индентором, где $x = v_b t$. При втором и последующих проходах индентора по детали этот пластический след будет влиять на характер эволюции параметров уравнения (4.47). Считаем, что за время одного полного прохода упругие напряжения релаксируют и $d_{el}(x) = 0$. Но при этом при вторичном прохождении индентор смещается на соседний участок цилиндра, и частично идет по уже продавленному пластическому следу $d_{pl}(x)$. Влияние продавленного следа $d_{pl}(x)$ будет тем больше, чем меньше скорость бокового сдвига индентора. При его фиксированном положении индентор вообще все время будет проходить по одному и тому же следу $d_{pl}(x)$, с каждым разом углубляя его.

4.4.2. Результаты моделирования и обсуждение

Нами было проведено моделирование, состоящее в численном решении уравнения (4.47) методом Рунге-Кутты 4 порядка точности. При первом проходе, как было описано выше, $y \equiv d_{el} + d_{pl}$. При втором и последующих проходах считалось, что индентор идет не по ровной поверхности $y = 0$, а по 30% от глубины уже продавленного следа. Программно это реализовывалось следующим образом. При первом проходе запоминался массив значений $d_{pl}^i(t)$, состоящий из $N = t_{\max}/\Delta t$ элементов, соответствующих точкам разбиения по оси времени t , где Δt — шаг разбиения по времени, t_{\max} — время одного полного прохода. При втором проходе также решалось уравнение (4.47), но перед расчетом силы F_c (4.52) применялась процедура

$$y^{i+1}(t) = y^{i+1}(t) - A' \cdot d_{pl}^i(t), \quad (4.57)$$

где $y^{i+1}(t)$ – значение координаты индентора, рассчитанное для нового прохода, а $d_{pl}^i(t)$ – значение глубины пластического следа от предыдущего прохода. Параметр $A' = 0.3$ показывает, что индентор проходит на 30% глубине следа от предыдущего прохода. Согласно формуле (4.57), если координата $y^{i+1}(t)$ превышает 30% глубины предыдущего прохода, идет новое продавливание, а если $y^{i+1}(t)$ меньше этой величины, то сила $F_c = 0$ и деформирования области прохода не происходит. После такого расчета мы получаем глубину продавливания для нового прохода $d_{pl}^{i+1}(t)$. Произведя пересчет по формуле

$$d_{pl}^{i+1}(t) = d_{pl}^{i+1}(t) + A' \cdot d_{pl}^i(t) \quad (4.58)$$

мы получим пластический след $d_{pl}^{i+1}(t)$ после второго прохода. При третьем проходе индентор идет по 30% глубины пластического следа от второго прохода, и так при каждом последующем проходе.

На рис. 4.21 показаны результаты моделирования для 50 проходов индентора. Здесь индентор движется в направлении оси абсцисс, после каждого прохода возвращаясь в исходную позицию по абсциссе, и сдвигаясь при этом на фиксированное расстояние вверх по ординате. Отметим, что характер эволюции системы существенно зависит от начальных условий $y(0), \dot{y}(0)$. Для верхней панели рис. 4.21 при возвращении индентора к позиции $x = 0$ время обнуляется и выбираются начальные условия $y(0) = 15 \cdot 10^{-6}$ м, $\dot{y}(0) = 0$. Поэтому на начальных временах, до того как индентор пойдет по оставленному ранее пластическому следу, зависимости $d_{pl}(x)$ подобны и представляют режим затухающих колебаний. При первом проходе в результате затухающих колебаний устанавливается стационарное значение координаты y_0 , которая определяется как корень кубического уравнения

$$y_0^3 - \left(\frac{2F_b}{\pi R \sigma_c} \right) y_0^2 + \left(\frac{F_b^2}{\pi^2 R^2 \sigma_c^2} \right) y_0 - \frac{F_b^2}{4R(E^*)^2} = 0. \quad (4.59)$$

При выбранных параметрах модели (см. подпись к рис. 4.21) стационарная коор-

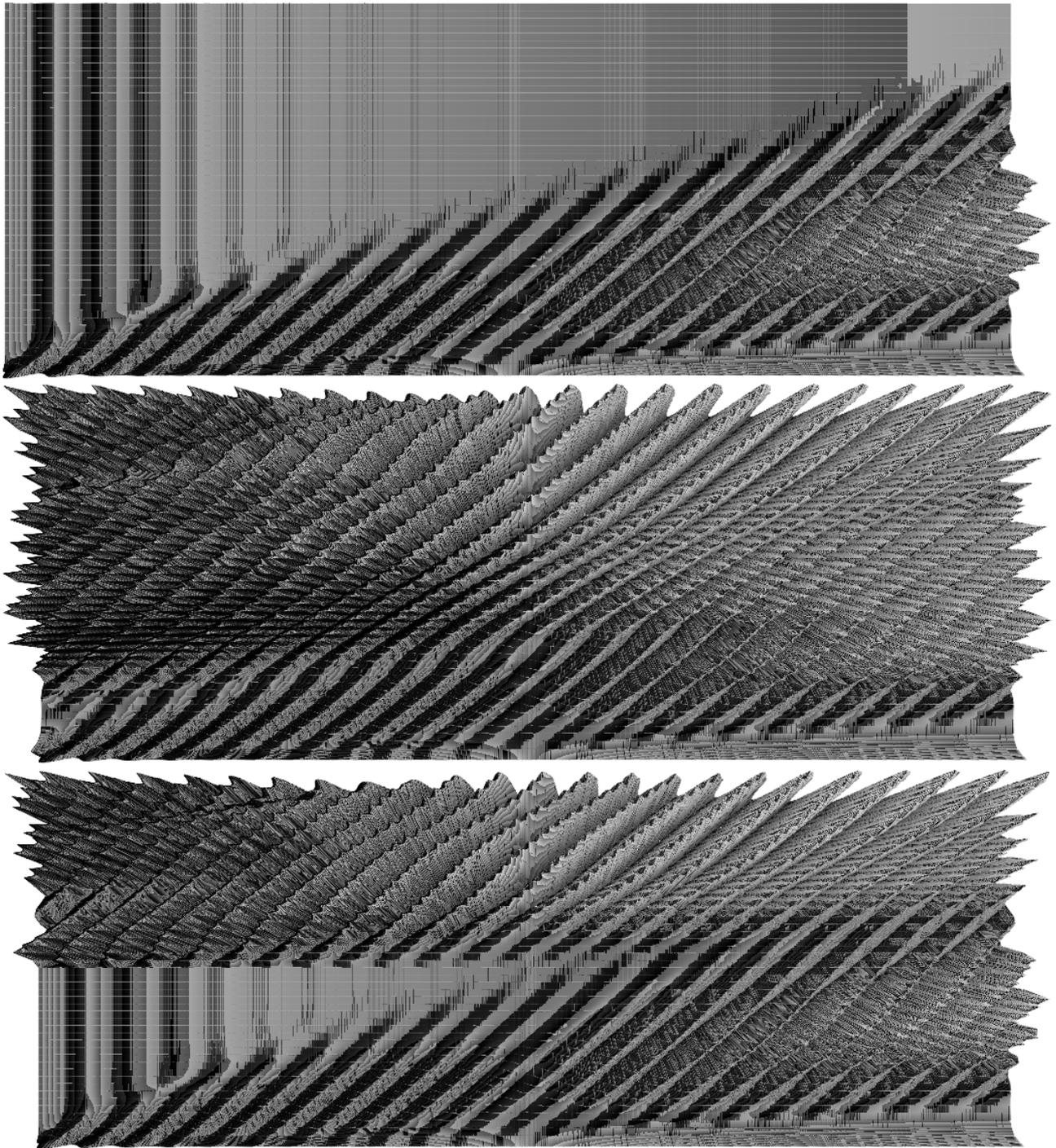


Рис. 4.21. Результаты моделирования при параметрах $m = 0,008$ кг; $R = 0,003$ м; $\sigma_c = 1,5 \cdot 10^9$ Па; $\eta = 60$ кг·м/с; $E^* = 10^{11}$ Па; $F_b = 120$ Н. Решение уравнения проводилось с шагом по времени $\Delta t = 10^{-9}$ с. Один проход соответствует времени $t_{\max} = 0,004$ с. Глубина продавливания d_{pl} на рисунке показана градациями серого и изменяется от 0 до 31 мкм.

дината y_0 определяется как

$$y_0 = \frac{36^{-2/3} (B + 2\sqrt[3]{6}F_b(E^*)^2\pi\sigma_c)}{B\pi^2\sigma_c^2(E^*)^2R},$$

$$B = \left[F_b \left(9\pi R\sigma_c + \sqrt{\frac{81R^2\pi^3\sigma_c^3 - 48F_b(E^*)^2}{\pi\sigma_c}} \right) \pi^2\sigma_c^2(E^*)^2 \right]^{2/3}. \quad (4.60)$$

При выбранных параметрах модели $y_0 \approx 11.692$ мкм, что соответствует стационарной глубине пластического продавливания $d_{pl} \approx 8.49$ мкм. Эти значения согласуются с зависимостями, показанными на рис. 4.20.

Отметим, что в верхней части рисунка видна область стационарного выглаживания, где колебания отсутствуют. Однако глубина продавливания здесь больше, чем при первом проходе, поскольку оказывает влияние пластический след после предыдущих проходов индентора. Этот случай в некотором смысле эквивалентен существованию неоднородности в начале оси $x = 0$, которая при прохождении через нее индентора изменяет его координату y и скорость движения \dot{y} , которые играют роль начальных условий для нового прохода. В роли неоднородности может выступать, например, просверленное в цилиндре углубление. Верхняя панель на рис. 4.21 хорошо повторяет эксперимент по обработке цилиндрической детали, результат которого показан на рис. 4.22, где в роли неоднородности как раз выступает просверленное углубление. Причем на симуляции наблюдаются те же особенности, как и в эксперименте [282]: присутствует область возбуждения вибраций индентора, область незатухающих колебаний индентора, область затуха-



Рис. 4.22. Образец после наноструктурирующего выглаживания [30, 282]. Внизу слева просверлено углубление.

ющих колебаний, область выглаженной поверхности после затухания вибраций, область поверхности при расходящихся колебаниях.

На средней панели рис. 4.21 обнуления времени не происходит и начальные условия выбираются только один раз $y(0) = 15 \cdot 10^{-6}$ м, $\dot{y}(0) = 0$, а при возвращении к позиции $x = 0$ продолжается решение уравнения (4.47) с учетом уже имеющегося пластического следа, но используя как начальные условия значения y , \dot{y} на предыдущем временном шаге. Поэтому в этом случае картина правого края рисунка повторяет картину левого, что эквивалентно полному проходу по обрабатываемой детали без неоднородностей. Картина подобна верхней части рис. 4.22, где индентор при прохождении по поверхности детали уже не задевает углубление. И нижняя панель рисунка объединяет две ситуации – первые 25 проходов для каждого нового прохода выбираются начальные условия как и для верхней панели рисунка (т.е. моделируется неоднородность), а для последующих 25 проходов начальные условия для нового прохода не изменяются, как на средней панели рис. 4.21. При этом получаемая картина качественно повторяет результаты эксперимента на рис. 4.22, включая клин ровной поверхности, разграничивающий область с неоднородностью и область незатухающих колебаний.

Можно учитывать неоднородности не при изменении начальных условий, а вписывая их в изначальный профиль поверхности. На рис. 4.23 показан результат моделирования для поверхности, в которой просверлено сферическое углубление. Процедура моделирования аналогична процедуре, с помощью которой полу-

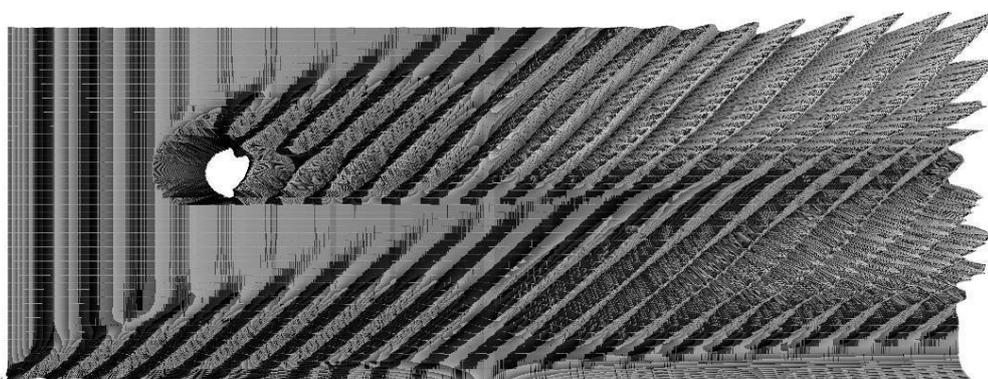


Рис. 4.23. Результат моделирования обработки поверхности с просверленным сферическим углублением.

чена верхняя панель на рис. 4.21. Учет наличия углубления проводился следующим образом. На всех шагах решения уравнения (4.47) рассчитывалась величина

$$\bar{s}^2 = 0,05^2 - (i\Delta t/t_{\max} - 0,2)^2 - \frac{(p/50 - 0,6)^2}{4}, \quad (4.61)$$

где p — номер прохода (от 1 до 50); i — номер шага по времени, для каждого прохода изменяется от 1 до $t_{\max}/\Delta t$. Величины 0,2 и 0,6 в уравнении (4.61) — это координаты центра углубления на рис. 4.23, которые изменяются от 0 в начале осей до 1 в конце, 50 — это полное число проходов, а 0,05 — радиус углубления (5% от длины всей плоскости). При решении уравнения, как и ранее, применялись процедуры (4.57), (4.58), но перед использованием (4.57) в случае $\bar{s}^2 > 0$ проводилась проверка. Если выполнялось неравенство

$$A' \cdot d_{pl}^i(t) < 6 \cdot 10^{-4}\bar{s}, \quad (4.62)$$

то величина $A' \cdot d_{pl}^i(t)$ в соотношениях (4.57), (4.58) заменялось на значение $6 \cdot 10^{-4}\bar{s}$. Здесь множитель $6 \cdot 10^{-4}$ м задает глубину углубления. Описанная процедура позволяет учитывать влияние от неоднородности в виде просверленного углубления только в том случае, если продавленный за предыдущие проходы след, по которому идет индентор, находится не ниже глубины углубления. Рис. 4.23 показывает поверхность в тех же диапазонах глубин продавливания — от 0 до 31 мкм. Белое пятно в центре углубления указывает на то, что оно глубже указанного диапазона. На рисунке видно, что первоначально симметричное углубление деформируется и после его прохождения возникает колебательный режим выглаживания. Это согласуется с результатами эксперимента, показанными на рис. 4.22.

На вид получаемых после выглаживания поверхностей критическим образом влияет соотношение между параметрами модели. Причем ключевую роль играет форма пластического следа после первого прохода индентора, поскольку последующие проходы индентор частично идет по ранее продавленному следу. Напомним, что при первом проходе $d_{el} + d_{pl} \equiv y$. При выбранном значении силы выглаживания $F_b = 120$ Н из рис. 4.20б следует значение контактной жестко-

сти $K \approx 11,7 \cdot 10^6$ Н/м. С учетом этого уравнение (4.47) можно заменить приближенной аппроксимацией

$$\frac{d^2y}{dt^2} + \frac{\eta}{m} \frac{dy}{dt} + \frac{K}{m}y = \frac{F_b}{m}. \quad (4.63)$$

Найденное из (4.63) стационарное значение глубины вдавливания индентора при первом проходе $y_0 \approx F_b/K \approx 10,26$ мкм отличается от точного значения, определяемого формулой (4.60), приблизительно на 12%. Согласно уравнению (4.63), индентор осуществляет колебания с циклической частотой

$$\omega = \sqrt{\frac{K}{m} - \frac{\eta^2}{4m^2}}. \quad (4.64)$$

Из последнего выражения следует, что при выполнении условия $\eta > \eta_c = 2\sqrt{Km}$ наступает ангармонический режим, в котором колебания отсутствуют. Выполнение этого условия обеспечивает технологически предпочтительный режим стационарного выглаживания. При выбранных параметрах модели $\eta_c \approx 612$ кг·м/с.

4.5. Выводы к разделу 4

1. Установлено, что в случае, когда смазочный слой зажат между поверхностями, обладающими наноразмерными неровностями, возможна ситуация, в которой по площади контакта присутствуют жидкоподобные и твердоподобные области, вносящие различный вклад в силу трения. Зависимость силы трения от времени не является строго периодической, но близка к таковой, что совпадает с известными экспериментальными данными.

2. Проведено моделирование пространственно неоднородного распределения параметра порядка, для чего учтено градиентное слагаемое в разложении свободной энергии. Смазка быстро релаксирует к однородному состоянию. Это приводит к тому, что зависимость параметра порядка от скорости сдвига для всех областей по площади контакта имеет один и тот же вид. При моделировании используются периодические граничные условия и краевые эффекты не учитываются.

3. В результате моделирования процесса граничного трения с учетом упругих свойств контактирующих тел показано, что движение с постоянной скоростью приводит к прерывистому режиму плавления, которое начинается на внешней границе контакта и распространяется внутрь к центру системы. Волна плавления сопровождается волной рекристаллизации. В зависимости от термодинамических и кинетических параметров системы возможно полное либо частичное затвердевание смазки при движении трущихся поверхностей.

4. Построена динамическая модель наноструктурирующего выглаживания, описывающая движение индентора, и учитывающая упругое и пластическое деформирование поверхностного слоя под действием выглаживающей силы. Показано, что в широком диапазоне параметров реализуется колебательный режим, в котором выглаженная деталь имеет волнистую поверхность. Результаты моделирования качественно воссоздают эксперимент по выглаживанию цилиндра с неоднородностью в виде просверленного в нем углубления.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в статьях [27, 28, 30, 31, 33, 34, 37, 41], статье в материалах конференции [55] и тезисах докладов на конференциях [63, 65, 70, 73].

РАЗДЕЛ 5

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕЙ НАГРУЗКИ НА ПОВЕРХНОСТИ ТРЕНИЯ

В предыдущих разделах диссертации на основе термодинамической модели, предложенной В. Л. Поповым [121, 122, 151], исследованы два типа трибологических систем. Проведено исследование прерывистого режима трения, универсальной зависимости вязкости, проведен учет пространственной неоднородности и шероховатостей поверхностей, описано влияние температуры смазки и скорости сдвига на кинетические режимы, исследованы особенности гистерезисных явлений. Изучен случай, в котором модель естественным образом описывает появление статической силы трения. Анализ литературных источников показал, что практически все полученные результаты хорошо согласуются с известными на сегодняшний день экспериментальными данными. Некоторые результаты исследований в рамках рассматриваемого подхода являются прогнозирующими, поскольку соответствующие экспериментальные работы нам неизвестны. Таким образом, предложенная теория позволяет продвинуться в понимании поведения нанотрибологических систем, описание которых на укладывается в стандартные представления классической физики трения. Однако, существенным ограничением модели является тот факт, что она не учитывает явным образом нагрузку, приложенную к поверхностям трения. По большому счету это оправдано только в тех экспериментальных ситуациях, в которых не изменяются параметры нагрузки, а измерения проводятся при одном и том же значении внешнего давления. Однако, очень часто внешняя нагрузка влияет на поведение трибологической системы критическим образом (см. к примеру рис. 1.6 литературного обзора). В этом и последующем разделах диссертации предложена разработанная нами модель, основанная на теории фазовых переходов Ландау и соотношениях теории упругости, которая фактически является расширенным вариантом модели В. Л. Попова, и позволяет воспроизвести многие численные результаты предыдущих разделов, а также описать влияние внешнего нагружения на трущиеся поверхности.

5.1. Несимметричный потенциал

5.1.1. Избыточный объем как параметр порядка

О плавлении смазочного материала толщиной менее 10 молекулярных слоев судят по увеличению его объема [13, 283] и коэффициента диффузии [13, 128, 133]. Поскольку экспериментально наблюдаемой величиной из этих двух является объем, для описания состояния смазки удобно ввести параметр f , представляющий избыточный объем, возникающий за счет хаотизации структуры твердого тела в процессе плавления. С увеличением f растет плотность дефектов в смазке, и за счет их транспорта под действием приложенных напряжений она переходит в кинетический режим пластического течения (жидкоподобная фаза).

Избыточный объем можно определить различными способами. Для системы с заданными геометрическими характеристиками это может быть размерная величина, представляющая разницу между объемами смазочного материала до плавления и после. Однако, более целесообразно использовать безразмерную величину, представляющую отношение дополнительного объема δQ , возникающего за счет плавления, к начальному значению Q . Причем за нулевое значение таким образом определенного параметра порядка $\delta Q/Q$ в случае использования квазисферических молекул целесообразно взять его значение в твердоподобном состоянии. Для полимерных цепных молекул нулевым значением такого параметра более логично описывать упорядоченное состояние полимерных цепочек, когда они близки к структуре с плотной упаковкой, что в случае граничной смазки в динамическом случае может быть нереализуемо даже при температурах, близких к нулевым [12], например, за счет несоизмеримости межатомного расстояния для атомов трущихся поверхностей и используемого полимера. При определении параметра порядка будем использовать идеологию, предложенную для описания процессов граничного трения в работах Лемайтре [191, 192], где для описания состояния смазочного материала вводится параметр v_f , представляющий свободный объем, возникающий за счет хаотизации структуры твердого тела в процессе

плавления:

$$v_f = \frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_{rcp}}. \quad (5.1)$$

В выражении (5.1) величина ρ — это плотность частиц смазочного материала, а ρ_{rcp} — плотность плотной упаковки. Таким образом, свободный объем v_f растет с плавлением, а в случае упорядочения атомов в плотную упаковку он равен нулю. Важен тот факт, что условие положительности параметра (5.1) удовлетворяется автоматически, поскольку плотность ρ не может превышать значение ρ_{rcp} . Далее в работах [191, 192] вводится величина активационного объема v_0 , представляющая типичное значение избыточного свободного объема, при котором становится возможной перегруппировка атомов в смазочном слое. Величина v_0 уменьшается с ростом упругих сдвиговых напряжений, поскольку их рост приводит к уменьшению энергетического барьера, преодоление которого необходимо для перестройки атомов [121, 247, 284].

В работах [191, 192] для описания структурного состояния смазочного материала вводится параметр безразмерного свободного объема

$$\chi = \frac{v_f}{v_0}, \quad (5.2)$$

значение которого увеличивается с разжижением и последующим плавлением смазочного материала, причем увеличение параметра χ может происходить как за счет роста температуры, так и сдвиговых напряжений. Таким образом определенный параметр порядка растет как с увеличением свободного объема v_f , так и с уменьшением величины активационного объема v_0 . В частности, с ростом параметра χ уменьшается вязкость смазочного материала согласно формуле [192]

$$\eta = \frac{1}{E_0} \exp\left(\frac{1}{\chi}\right), \quad (5.3)$$

где константа E_0 зависит от свойств используемой смазки. В работе [191] параметр порядка χ изменяется от 0 в твердоподобном состоянии смазочного материала до 15 в режиме скольжения. Причем при фазовом переходе между указанными режимами нарастание параметра χ происходит довольно быстро.

В предлагаемом нами рассмотрении в качестве параметра порядка удобно использовать визуально наблюдаемое значение избыточного объема f , вычисляе-

мое по формуле (5.2), где в качестве v_0 используется не активационный объем, а объем плотной упаковки:

$$v_0 = \frac{1}{\rho_{rcp}}. \quad (5.4)$$

При этом параметр порядка f запишется в виде

$$f = \frac{v_f}{v_0} = \frac{1/\rho - 1/\rho_{rcp}}{1/\rho_{rcp}} = \frac{\rho_{rcp} - \rho}{\rho} \quad (5.5)$$

и будет иметь смысл не свободного объема χ , а дополнительного избыточного объема $\delta Q/Q$, который возникает при плавлении смазочного слоя. Таким образом определенный параметр порядка будет изменяться в менее широком диапазоне, чем параметр χ , который может принимать значения больше 10 [191]. Однако, если при плавлении объемных смазочных слоев дополнительный объем, как правило, составляет несколько процентов, то для граничных смазок в динамическом режиме при сдвиге трущихся поверхностей и их последующем движении после плавления смазочного материала его объем может увеличиваться более чем в 2 раза по сравнению с твердоподобным состоянием. Это показывают как результаты компьютерного моделирования [13], так и непосредственно эксперименты [13, 285].

5.1.2. Основные уравнения

Запишем зависимость плотности свободной энергии Φ от избыточного объема в форме разложения по параметру f в виде [49]

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{c}{2} (\nabla f)^2 - \phi_0 f + \frac{1}{2} \phi_1 f^2 - \frac{1}{3} \phi_2 f^3 + \frac{1}{4} \phi_3 f^4, \quad (5.6)$$

где $\Phi_0, c, \phi_0, \phi_1, \phi_2, \phi_3$ — параметры разложения. Далее для простоты рассматривается однородная система, и в последнем выражении полагается $\nabla^2 f \equiv 0$.

Зависимость от инвариантов упругих деформаций ε_{ij}^e и температуры T учтем только при младших степенях разложения:

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \Phi_0^* + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2, \\ \phi_0 &= \phi_0^* + \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha T. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Первый инвариант представляет след тензора деформаций $\varepsilon_{ii}^e = \varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e$, а второй определяется выражением [286]

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 \equiv (\varepsilon_{ii}^e)^2 - 2I_2 = (\varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e)^2 - 2(\varepsilon_1^e \varepsilon_2^e + \varepsilon_1^e \varepsilon_3^e + \varepsilon_2^e \varepsilon_3^e) = (\varepsilon_1^e)^2 + (\varepsilon_2^e)^2 + (\varepsilon_3^e)^2. \quad (5.8)$$

Согласно разложению (5.6) упругие напряжения, возникающие в смазочном слое, определяются как

$$\sigma_{ij}^e = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f. \quad (5.9)$$

Выражение (5.9) можно представить в виде эффективного закона Гука [287]

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu_{eff} \varepsilon_{ij}^e + \lambda_{eff} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} \quad (5.10)$$

с эффективными упругими параметрами¹⁵

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu} f, \quad (5.11)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda} f, \quad (5.12)$$

которые уменьшаются с плавлением при возрастании избыточного объема f .

Несложно показать, что (см. Приложение А)

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}, \quad (5.13)$$

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau}{\mu_{eff}} \right)^2 + (\varepsilon_{ii}^e)^2 \right], \quad (5.14)$$

где n , τ — нормальная и касательная компоненты напряжений, действующих на смазочный слой со стороны трущихся поверхностей. Параметр μ_{eff} в выражении (5.10) — это модуль сдвига [286]. Будем далее обозначать упругие сдвиговые напряжения τ , а упругую компоненту сдвиговых деформаций — ε_{el} . Тогда напряжения τ определяются из выражения (5.10), которое при $i \neq j$ ($\delta_{ij} = 0$) приводит к зависимости [286]

$$\tau = \mu_{eff} \varepsilon_{el}. \quad (5.15)$$

¹⁵При $f > \mu/\bar{\mu}$ следует полагать $\mu_{eff} = 0$, а когда $f > \lambda/\bar{\lambda}$, необходимо принимать $\lambda_{eff} = 0$.

Поскольку возможна ситуация $\mu_{eff} = 0$, непосредственно при моделировании более удобно использовать выражение для второго инварианта с учетом (5.15):

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \frac{1}{2} \left[\varepsilon_{el}^2 + (\varepsilon_{ii}^e)^2 \right], \quad (5.16)$$

которое представляет второй инвариант как функцию сдвиговых деформаций ε_{el} . Запишем эволюционное уравнение для неравновесного параметра f в виде уравнения Ландау – Халатникова (ср. с (2.34))

$$\tau_f \dot{f} = -\frac{\partial \Phi}{\partial f}, \quad (5.17)$$

где введено время релаксации τ_f . В явном виде оно запишется как

$$\tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = \phi_0 - \phi_1 f + \phi_2 f^2 - \phi_3 f^3 - \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (5.18)$$

где появление последнего слагаемого связано с тем, что инварианты (5.13) и (5.14) зависят от параметра порядка f . При движении поверхностей трения в смазочном слое возникают сдвиговые упругие деформации ε_{el} , задающиеся уравнением (2.16).

5.1.3. Термодинамическое и сдвиговое плавление

Система кинетических уравнений (5.18), (2.15) с учетом определений (5.7), (5.10) – (5.14) является замкнутой и может быть использована для исследования кинетики плавления смазочного материала. В данном разделе рассмотрим стационарные режимы трения, устанавливающиеся в результате эволюции системы. Согласно уравнению (2.15) с течением времени устанавливается стационарное значение упругой компоненты сдвиговой деформации ε_{el} , задающееся выражением (2.16). Для нахождения стационарных состояний всех величин необходимо численно решить эволюционное уравнение (5.18), используя (5.7), (5.10) – (5.14), и определяя при этом значение упругой деформации ε_{el} из (2.16).

Как это было указано ранее, в экспериментах часто в качестве поверхностей трения используются атомарно-гладкие поверхности слюды, а в роли

смазки — квазисферические молекулы ОМЦТС и линейные цепные молекулы тетрадекана либо гексадекана [12, 87, 288]. Указанные эксперименты проводятся при следующих условиях: толщина смазочного материала $h \sim 10^{-9}$ м, площадь контакта $A \sim 3 \cdot 10^{-9}$ м², нагружение на верхнюю поверхность трения $L = (2 \div 60) \cdot 10^{-3}$ Н, что соответствует нормальным напряжениям $n = -L/A = -(6,67 \div 200) \cdot 10^5$ Па. Сила трения при этом составляет $F \sim (2 \div 40) \cdot 10^{-3}$ Н. В рамках указанных экспериментальных работ найдено, что смазочный материал плавится при превышении температурой критического значения $T > T_0 \sim 300$ К, либо при скорости сдвига $V > V_c \sim 400$ нм/с. Эти значения могут существенно изменяться в зависимости от используемого смазочного материала и геометрии эксперимента (см. предыдущие разделы диссертационной работы).

В рассматриваемой модели выбираются следующие значения констант теории: $\Phi_0^* = 20$ Дж/м³, $\lambda = 10^{10}$ Па, $\bar{\lambda} = 10^9$ Па, $\mu = 2 \cdot 10^{10}$ Па, $\bar{\mu} = 10^{11}$ Па, $\phi_0^* = 25$ Дж/м³, $\phi_1 = 27500$ Дж/м³, $\phi_2 = 337500$ Дж/м³, $\phi_3 = 1293750$ Дж/м³, $\alpha = 2,4$ Дж·К⁻¹/м³, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$ с, $n = -7 \cdot 10^5$ Па. Отметим, что время релаксации избыточного объема τ_f имеет размерность вязкости. Фактически это означает, что с ростом эффективной вязкости смазочного материала время установления стационарного режима трения увеличивается [289].

При нулевой скорости сдвига (сдвиговые напряжения и деформации равны нулю) и температуре ниже критического значения $T < T_{c0}$ смазочный материал твердоподобный, а избыточный объем f принимает малое значение, растущее с температурой T (штрихпунктирный участок кривой 1 на рис. 5.1а). При температуре $T = T_{c0}$ избыточный объем скачкообразно увеличивается и смазка переходит в устойчивое жидкоподобное состояние (сплошной участок кривой). С дальнейшим понижением температуры она затвердевает уже при ее меньшем значении $T = T_c^0$. Зависимость имеет гистерезисный характер, что соответствует фазовым переходам первого рода. Согласно рис. 5.1а с повышением скорости сдвига смазка плавится при меньших значениях температуры. При скорости выше критического значения она вне зависимости от температуры всегда жидкопо-

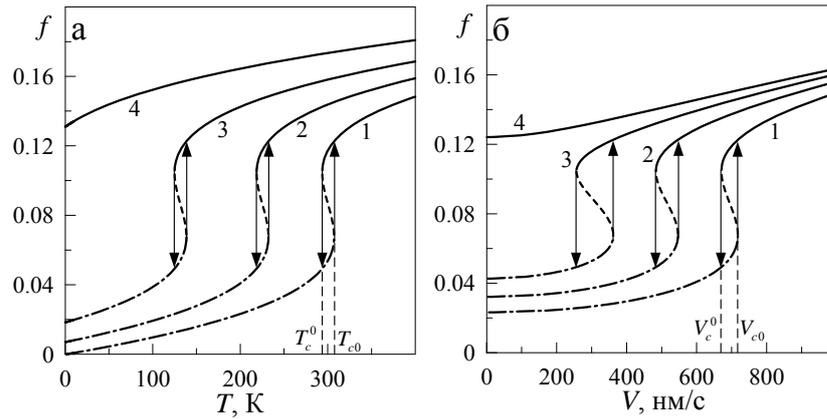


Рис. 5.1. Зависимость стационарного значения избыточного объема f от температуры смазки T и скорости сдвига V : (а) кривые 1–4 соответствуют скоростям $V = 0, 600, 900, 1250$ нм/с; (б) кривые 1–4 соответствуют температурам $T = 200, 245, 280, 310$ К.

добна (кривая 4), при этом наступает полное плавление за счет сдвига. Отметим, что в отличие от рис. 2.4 и рис. 2.20, на рис. 5.1 ненулевое значение параметра порядка соответствует как твердоподобной, так и жидкоподобной структуре смазочного материала. Ранее такая ситуация рассматривалась в подразделе 3.4 диссертационной работы, в котором указано, что такое поведение соответствует смазочным материалам, состоящим из цепных полимерных молекул [12].

На рис. 5.2а приведена зависимость плотности свободной энергии Φ (5.6) от величины параметра порядка f при параметрах кривой 1 на рис. 5.1а. При малых температурах (верхняя кривая) реализуется единственный минимум потенциала при малом значении f (твёрдоподобная смазка), который соответствует штрихпунктирному участку кривой 1 на рис. 5.1а. При повышении температуры (средняя кривая) появляется дополнительный минимум, отвечающий сплошному участку кривой 1 на рис. 5.1а, однако система не может перейти в соответствующее ему состояние, поскольку он отделен от первого минимума максимумом энергии (штриховая часть кривой, рис. 5.1а). При дальнейшем увеличении T разграничивающий максимум исчезает (нижняя кривая на рис. 5.1а), и смазочный слой резко, по механизму фазового превращения первого рода, переходит в состояние, соответствующее минимуму потенциала при большом значении избыточного объема f , т.е. плавится. Если теперь понижать температуру, то при появлении минимума при малом f система снова не сможет резко перейти в со-

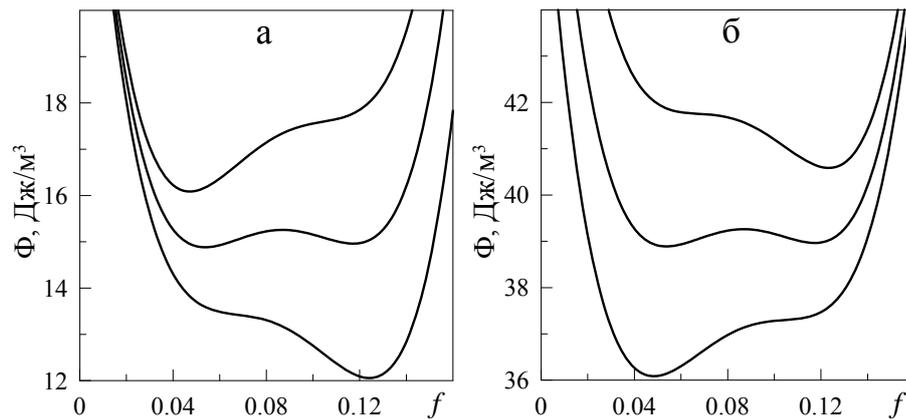


Рис. 5.2. Зависимость плотности свободной энергии Φ (5.6) от параметра порядка f : (а) кривые, расположенные сверху вниз, соответствуют температурам $T = 290, 300, 310$ К и нулевой скорости сдвига; (б) кривые, расположенные снизу вверх, соответствуют скоростям сдвига $V = 450, 490, 530$ нм/с и температуре $T = 250$ К.

ответствующее состояние из-за наличия разграничивающего максимума. С его исчезновением при $T = T_c^0$ смазочный слой скачкообразно затвердеет.

Если температура смазки фиксирована, то при превышении скоростью сдвига критического значения V_{c0} происходит плавление, а когда $V < V_c^0$, смазка затвердевает (рис. 5.1б). В этом случае реализуется ситуация, схожая с поведением системы при повышении температуры (см. рис. 5.1а), с тем отличием, что в случае сдвигового плавления с увеличением температуры смазки растет площадь фигуры, ограниченной гистерезисом. С повышением температуры смазка плавится при меньших скоростях сдвига. На рис. 5.2б показаны профили свободной энергии при параметрах кривой 1 на рис. 5.1б, которые аналогичны профилям энергии при плавлении смазочного материала с повышением температуры.

На рис. 5.3а показаны зависимости критических скоростей плавления V_{c0} и затвердевания V_c^0 от температуры смазки T (ср. с рис. 2.6, рис. 2.21 и рис. 3.13). Выше кривой V_{c0} смазка жидкоподобна, и реализуется режим жидкостного трения. При значениях скорости сдвига ниже V_c^0 реализуется твердоподобное состояние. Между кривыми на рис. 5.3а реализуется область гистерезиса, показанная на рис. 5.1 и соответствующая виду потенциала, показанного средними кривыми на рис. 5.2. Согласно рис. 5.3а с ростом температуры обе критические скорости уменьшаются, пока не станут равными нулю и не наступит полное термо-

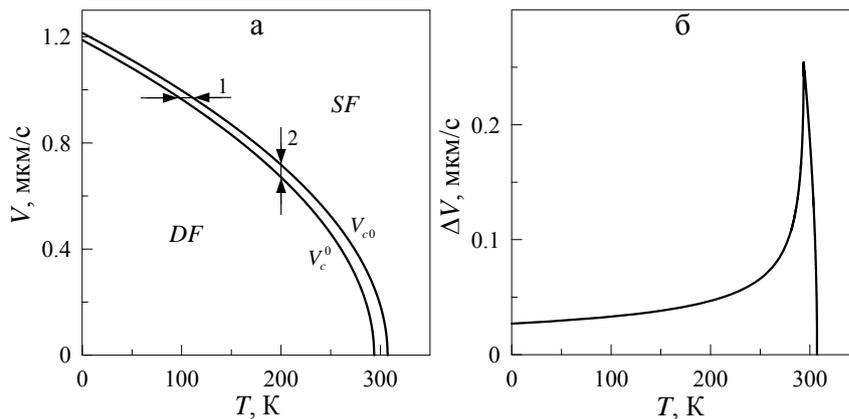


Рис. 5.3. (а) фазовая диаграмма с областями жидкостного (SF) и сухого (DF) трения; (б) зависимость ширины гистерезиса $\Delta V = V_{c0} - V_c^0$ от температуры смазочного материала T .

динамическое плавление. Отметим, что смазка плавится даже при нулевой температуре T , если скорость сдвига превышает критическое значение (граница области SF на оси ординат). Таким образом, рис. 5.3а представляет фазовую диаграмму с двумя стационарными режимами трения. Расстояние между кривыми на рисунке по горизонтали при постоянной скорости (отрезок 1) представляет ширину гистерезиса, который реализуется на рис. 5.1а, а расстояние по вертикали при $T = \text{const}$ (отрезок 2) задает ширину гистерезиса на рис. 5.1б. Из рис. 5.1а следует, что ширина гистерезиса от температуры (отрезок 1) при изменении скорости остается постоянной, в то время как гистерезис от скорости (отрезок 2) при повышении температуры становится значительно шире по сравнению с малыми температурами. Этот факт отражен на рис. 5.1.

На рис. 5.3б приведена зависимость ширины гистерезиса $\Delta V = V_{c0} - V_c^0$, показанного на рис. 5.1б, от температуры T . Указанная зависимость получена при перемещении отрезка 2 на рис. 5.3а вдоль оси T . Практически во всем диапазоне температур ширина петли гистерезиса увеличивается. Ее резкое уменьшение до нуля обусловлено тем, что согласно рис. 5.3а критическая скорость V_c^0 принимает нулевое значение при меньших температурах, чем V_{c0} , и после этого момента V_c^0 следует полагать равной нулю. Таким образом, пик на рис. 5.3б соответствует температуре, при которой скорость V_c^0 обращается в нуль. При такой температуре в случае плавления смазка уже не может затвердеть за счет понижения скорости (согласно рис. 5.3а при $V_c^0 = 0$ система не может попасть в об-

ласть DF , однако она может изначально находиться в промежуточной области, и при этом быть твердоподобной до значения скорости $V < V_{c0}$). Значение температуры на рис. 5.3б, при которой ширина гистерезиса становится нулевой, отвечает ситуации, когда смазочный материал жидкоподобен при любых начальных условиях и скоростях сдвига (согласно рис. 5.3а система в этом случае всегда находится в области жидкостного трения SF). Расчет зависимости ширины гистерезиса по температуре $\Delta T = T_{c0} - T_c^0$ от скорости V показывает, что она остается постоянной при всех скоростях и $\Delta T \approx 13,525$ К, за исключением скоростей, при которых температура T_c^0 равна нулю. Здесь, как и в случае, показанном на рис. 5.3б, ширина гистерезиса с повышением скорости монотонно обращается в нуль (см. рис. 5.3а).

5.1.4. Сила трения

В экспериментальных работах часто приводятся кинетические зависимости силы трения при различных скоростях сдвига, толщинах смазочного слоя, нормального давления [12,87,153,159,290]. Проанализируем влияние на силу трения температуры смазки, скорости сдвига, а также давления. Будем использовать выражение для силы трения (2.30), в котором упругие напряжения σ_{el} определяются формулой (5.15). Зависимость (2.30) показана на рис. 5.4 (ср. с рис. 2.7, рис. 2.22, рис. 2.31, рис. 3.2 и рис. 3.14). Все кривые на рис. 5.4а соответствуют параметрам кривых на рис. 5.1а, кроме кривой 1. Это связано с тем, что на рис. 5.1а первая кривая построена при нулевой скорости, а в состоянии покоя сила трения равна нулю. Кривые на рис. 5.4б все соответствуют параметрам кривых на рис. 5.1б.

Согласно рис. 5.4а с повышением температуры сила трения F уменьшается. Это происходит, поскольку увеличивается значение параметра f , а с его ростом уменьшается эффективный модуль сдвига μ_{eff} (5.11), что приводит к снижению значения упругой компоненты сдвиговых напряжений (5.15), и соответственно к меньшему значению силы трения (2.30). На зависимостях наблюдается гистерезис, потому как при фазовом переходе первого рода модуль сдвига (5.11) изме-

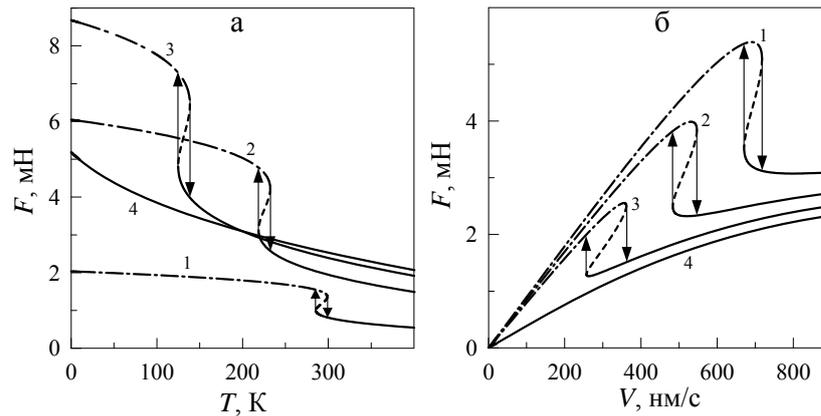


Рис. 5.4. Зависимости силы трения F (2.30) от скорости сдвига V и температуры смазки T при $\gamma = 2/3$, $k = 1, 2 \text{ Па}\cdot\text{с}^{5/3}$ и площади контакта $A = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$: (а) кривые 1–4 отвечают постоянным значениям скорости сдвига $V = 200, 600, 900, 1250 \text{ нм/с}$; (б) кривые 1–4 соответствуют фиксированным значениям температуры $T = 200, 245, 280, 310 \text{ К}$.

няется скачкообразно. При параметрах кривой 4 смазка всегда жидкоподобна, а сила трения F уменьшается с ростом температуры T за счет уменьшения модуля сдвига (разжижения смазки).

Рис. 5.4б демонстрирует несколько иное поведение. Здесь, согласно (2.30), при малых скоростях сдвига смазка твердоподобна, и значение τ (5.15) велико, реализуется сухое трение. Повышение скорости в режиме сухого трения приводит к росту силы трения F (2.30). При дальнейшем повышении скорости сдвига смазка плавится, и упругие сдвиговые напряжения τ (5.15) существенно уменьшаются, что приводит к резкому уменьшению полной силы трения. С дальнейшим увеличением скорости V значение F возрастает как за счет вязкой компоненты силы трения, растущей с повышением скорости, так и за счет роста упругих напряжений τ за счет увеличения упругих деформаций ε_{el} . Однако, при превышении скоростью сдвига критического значения упругие напряжения станут равны нулю, и дальнейший рост силы трения будет осуществляться только за счет роста скорости сдвига. Поэтому после плавления в общем случае зависимость $F(V)$ является немонотонной. Согласно кривой 4 в жидкоподобном состоянии сила трения (2.30) растет за счет увеличения вязкой и упругой компонент. Отметим, что результаты, представленные на рис. 5.4б, качественно совпадают с новой картой трения для граничного режима, полученной при обобщении экспериментальных

данных [134] и показанной на рис. 1.13б литературного обзора.

На рис. 5.5 приведена рассчитанная зависимость силы трения F от нормальных внешних напряжений $-n$, действие которых направлено на

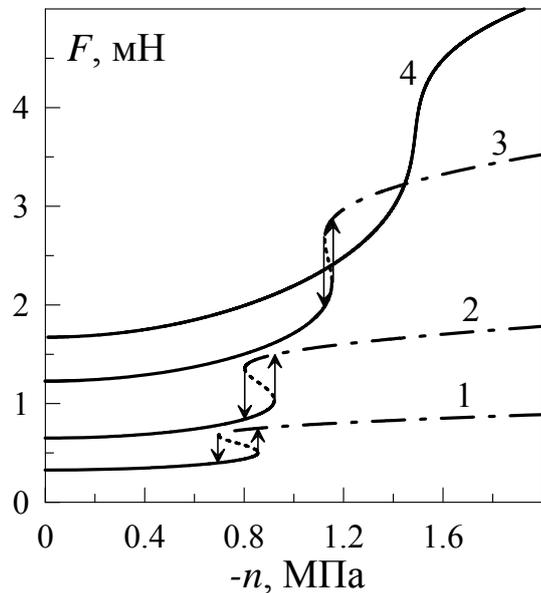


Рис. 5.5. Зависимость силы трения F от нормального давления на поверхности трения $-n$ при параметрах рис. 5.4 и температуре $T = 305$ К. Кривые 1–4 отвечают постоянным скоростям сдвига $V = 100, 200, 400, 600$ нм/с.

сжатие трущихся поверхностей. Согласно кривым 1–3, смазочный материал при малом значении нормальных нагрузок на поверхности трения имеет жидкоподобную структуру, а дальнейшее сдавливание поверхностей приводит к его затвердеванию, и как результат к увеличению полной силы трения F [291]. При больших скоростях сдвига (кривая 4) смазка в рассматриваемом диапазоне нагрузок всегда жидкоподобна. Подобная зависимость обсуждается в экспериментальной работе [134], и приведена на рис. 1.14 литературного обзора. Характерно, что нами теоретически описано появление гистерезисного поведения с увеличением скорости сдвига V , что ранее многократно наблюдалось экспериментально для рассматриваемых трибологических систем в режиме граничного трения.

5.1.5. Прерывистый режим

Для вычисления временной эволюции силы трения F в трибологической системе, показанной на рис. 1.21, уравнение (2.31) необходимо решать совместно с (5.18), определяя при этом силу трения F из (2.30), а упругую деформацию — из (2.16). Результат решения указанных уравнений показан на рис. 5.6, согласно которому в начале движения сила трения монотонно возрастает, поскольку смазка твердоподобна и увеличивается скорость сдвига V . Когда скорость превышает критическое значение V_{c0} , смазка плавится, за счет чего уменьшается си-

ла трения F , увеличивается скорость проскальзывания трущегося блока V , и он быстро перемещается на большое расстояние. При этом уменьшается натяжение пружины ΔX и соответственно скорость сдвига. Когда скорость становится меньше значения, необходимого для поддержания смазки в жидкоподобном

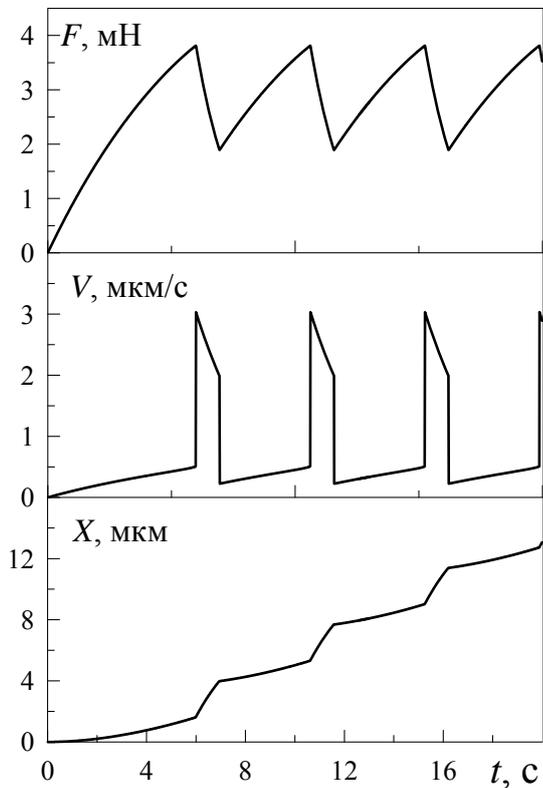


Рис. 5.6. Зависимость силы трения F , скорости сдвига блока V и его координаты X от времени t при параметрах рис. 5.4 и $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $M = 0,1$ кг, $K = 1200$ Н/м, $T = 250$ К, $V_0 = 800$ нм/с.

состоянии, она затвердевает, а сила трения снова начинает возрастать. Описанный процесс периодически повторяется во времени. Отметим, что скорость, при которой смазочный материал затвердевает, не совпадает с аналогичной скоростью, приведенной на рис. 5.1. Это связано с резким увеличением скорости сдвига V при плавлении и соответствующим увеличением избыточного объема f . Согласно (5.11) модуль сдвига при этом становится меньше нуля, и его необходимо считать нулевым, что искажает вид потенциала (5.6). При этом при наличии упругих деформаций (2.16) упругие напряжения в смазке согласно (5.15) равны нулю, что и обуславливает снижение силы трения, смазка при этом течет.

На рис. 5.7 показаны зависимости при увеличении скорости V_0 . Изначально движение верхнего сдвигаемого блока ($V_0 = V_{01}$) приводит к росту силы трения при малом значении f . Когда упругие сдвиговые напряжения достигают критического значения, наступает сдвиговое плавление по механизму фазового превращения первого рода, при этом параметр f испытывает скачкообразное увеличение, а упругие напряжения становятся нулевыми. Смазочный материал после этого снова начинает затвердевать, поскольку уменьшается относительная скорость сдвига поверхностей трения (см. рис. 5.6). Когда он затвердевает полностью, в нем появляются

ся упругие напряжения τ (5.15), последующий рост которых вновь приводит к увеличению параметра f , пока тот в свою очередь не достигнет критического значения, необходимого для плавления, и процесс повторится

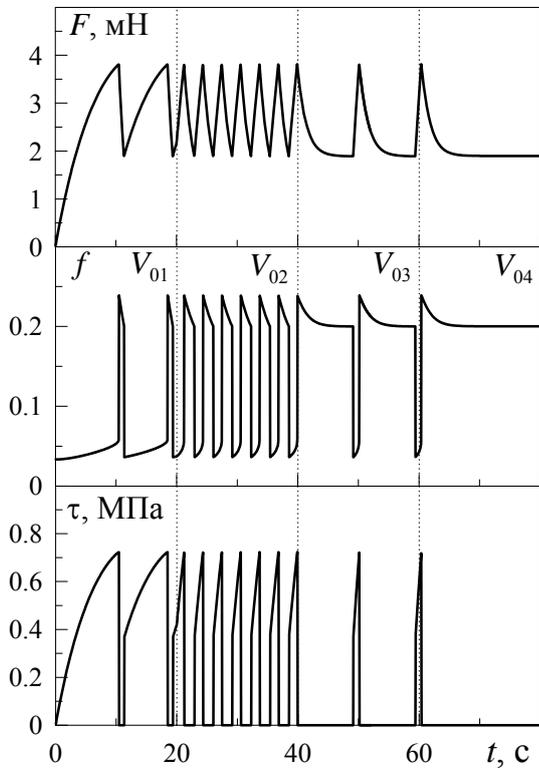


Рис. 5.7. Зависимость силы трения F , избыточного объема f и упругой компоненты сдвиговых напряжений τ (5.15) от времени t при параметрах рис. 5.6 и скоростях сдвига $V_{01-04} = 600, 1500, 1990, 1995$ нм/с.

увеличивается за счет быстрого увеличения скорости сдвига верхнего трущегося блока V , а стационарному кинетическому участку соответствует меньшее значение избыточного объема f , устанавливающееся после резкого изначального проскальзывания верхнего трущегося блока за счет высвобождения части механической потенциальной энергии сжатой пружины. При дальнейшем росте скорости до значения $V_0 = V_{04}$ прерывистый режим исчезает, и устанавливается кинетический режим трения, которому соответствует жидкоподобная структура смазочного материала. Таким образом, при увеличении скорости частота

снова. В результате устанавливается периодический прерывистый режим плавления/затвердевания. При повышении скорости до значения $V_0 = V_{02}$ частота *stick-slip* переходов увеличивается за счет того, что при этой скорости быстрее устанавливается критическое значение напряжений. Соответственно смазка быстрее плавится, и за один и тот же промежуток времени система успевает совершить большее количество переходов плавление/затвердевание. С еще бóльшим увеличением скорости до значения $V_0 = V_{03}$ частота *stick-slip* переходов снова уменьшается, за счет появления на зависимости $F(t)$ кинетических участков $F = \text{const}$, что не было описано в рамках модели В. Л. Попова [121] в предыдущих разделах диссертационной работы. Следует отметить, что в этом режиме при плавлении избыточный объем f сначала резко

stick-slip переходов сначала увеличивается, затем снова уменьшается за счет появления длинных кинетических участков $F = \text{const}$, а при превышении критического значения скорости V_0 режим *stick-slip* исчезает. Описанное поведение хорошо согласуется с экспериментальными данными [12].

В экспериментах также часто исследуется влияние на характер плавления смазки внешней нагрузки, приложенной перпендикулярно к поверхностям трения [12, 133]. Такие эксперименты показывают, что нагружение влияет на параметры трибологической системы нетривиальным образом [292–294]. Например, для смазок, состоящих из цепных молекул гексадекана с ростом нагрузки критическая скорость сдвига уменьшается, а для сферических молекул ОМЦТС она увеличивается [12]. Давление также влияет на частоту и амплитуду *stick-slip* переходов [12]. В рамках предлагаемой модели согласно

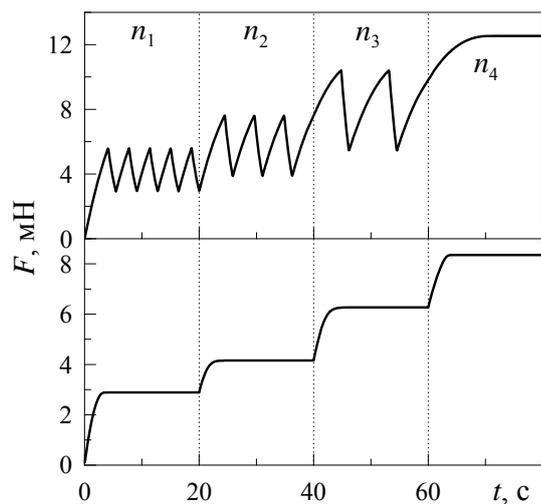


Рис. 5.8. Зависимость силы трения $F(t)$ при параметрах рис. 5.6, скорости сдвига $V_0 = 1500$ нм/с и внешней нормальной нагрузке $n_{1-4} = -1, 8; -2, 4; -3, 2; -3, 8$ МПа. Верхняя и нижняя панели соответствуют температурам $T = 290$ К и 600 К.

уравнению (5.18) рост нагрузки на поверхности трения приводит к уменьшению избыточного объема f , что должно способствовать затвердеванию смазки. На рис. 5.8 приведена временная зависимость силы трения при различных значениях нагрузки, действие которой направлено на сдавливание поверхностей трения. При температуре ниже критического значения (верхняя панель рисунка) реализуется прерывистый режим трения, причем с ростом давления увеличивается амплитуда *stick-slip* переходов, а также уменьшается их частота. При давлении, соответствующем нормальным напряжениям $n = n_4$, прерывистый режим не реализуется. Однако, при этом устанавливается не кинетический режим, отвечающий плавлению смазки, а происходит ее затвердевание по причине сдавливания стенок. За счет этого смазочный материал уже не может расплавиться, и устанавливается большое зна-

навливается не кинетический режим, отвечающий плавлению смазки, а происходит ее затвердевание по причине сдавливания стенок. За счет этого смазочный материал уже не может расплавиться, и устанавливается большое зна-

чение силы трения F , соответствующее твердоподобной структуре, поскольку сдавливание стенок способствует возникновению в смазочном слое дальнего порядка чередования атомов. На нижней панели рисунка представлена зависимость при более высокой температуре T . Здесь устанавливается кинетический режим трения, соответствующий малому значению силы трения F . С дальнейшим ростом давления следует ожидать установления прерывистого *stick-slip* режима движения, а с еще бóльшим увеличением нагрузки — наступления полного затвердевания смазки, как на верхней панели рисунка при $n = n_4$. Таким образом, обнаружены три режима трения: 1) кинетический режим, в котором смазка всегда жидкоподобна; 2) прерывистый режим, соответствующий периодическому плавлению/затвердеванию смазки; 3) режим сухого трения, характеризующийся большим значением силы трения и твердоподобной структурой смазочного слоя. Подобные режимы найдены также в рамках стохастической модели [19].

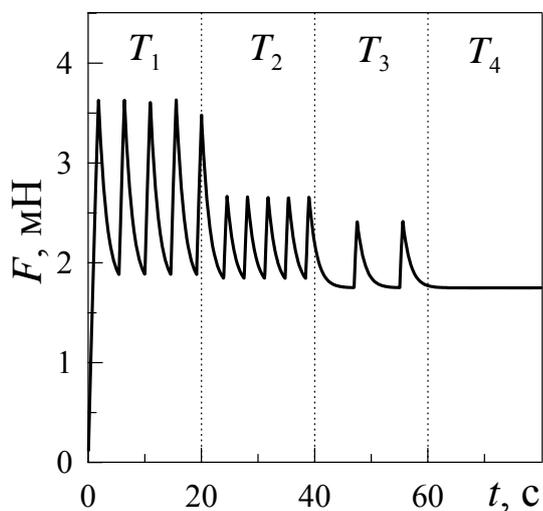


Рис. 5.9. Зависимость силы трения F от времени t при параметрах рис. 5.6, скорости $V_0 = 1900$ нм/с и температурах смазки $T_{1-4} = 255, 275, 323, 325$ К.

Согласно рис. 5.9, повышение температуры смазки приводит к снижению амплитуды колебаний силы трения, и изменению частоты фазовых переходов. При температуре $T = T_4$ наступает режим скольжения, характеризующийся постоянным значением кинетической силы трения и скорости сдвига трущегося блока. Таким образом, повышение температуры T способствует плавлению смазки. Эксперименты с подобным исследованием влияния температуры нам неизвестны, поэтому зависимости такого типа являются прогнозирующими.

5.2. Симметричный потенциал

В режиме граничного трения работают многие трибологические системы, в том числе и некоторые макроскопические узлы трения. Граничный режим возникает в

случае, когда смазочный материал либо имеет толщину в несколько атомарных слоев, либо отсутствует вовсе [295]. На особенности граничного режима сильно влияют как внешние условия, так и характеристики самой трибологической системы — тип поверхностей трения, используемый смазочный материал, упругие характеристики системы, и многое другое. Поэтому описать все ситуации в рамках единого подхода невозможно в принципе. Более того, в каждом конкретном случае следует записывать отдельное разложение свободной энергии типа (5.6), исходя из физического представления задачи. Поэтому в данном подразделе дополнительно исследуем поведение системы в случае симметричного разложения свободной энергии по степеням параметра порядка, что позволит расширить применимость теории на более широкий класс трибологических систем.

5.2.1. Основные уравнения

Запишем зависимость плотности свободной энергии Φ от избыточного объема в форме разложения по параметру f в виде (ср. с (5.6)) [52]:

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{c}{2} (\nabla f)^2 + \phi_0 f^2 - \frac{1}{4} \phi_1 f^4 + \frac{1}{6} \phi_2 f^6, \quad (5.19)$$

где параметры разложения

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \Phi_0^* + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2, \\ \phi_0 &= \phi_0^* - \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha T. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Согласно (5.19) упругие напряжения, возникающие в смазке, определяются как (ср. с (5.9))

$$\sigma_{ij}^e = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f^2. \quad (5.21)$$

Выражение (5.21) в виде эффективного закона Гука примет вид (5.10) с эффективными упругими параметрами¹⁶

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu} f^2, \quad (5.22)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda} f^2, \quad (5.23)$$

¹⁶При $f^2 > \mu/\bar{\mu}$ следует полагать $\mu_{eff} = 0$, а когда $f^2 > \lambda/\bar{\lambda}$, необходимо принимать $\lambda_{eff} = 0$.

которые уменьшаются с плавлением смазочного слоя при возрастании параметра f . В однородном случае потенциалу (5.19) соответствует кинетические уравнение в явном виде (ср. с (5.18)):

$$\tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = -2\phi_0 f + \phi_1 f^3 - \phi_2 f^5 - \frac{2n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu}) f}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (5.24)$$

5.2.2. Термодинамическое и сдвиговое плавление

В рассматриваемой модели выбираются следующие значения констант теории: $\Phi_0^* = 20$ Дж/м³, $\lambda = 10^{10}$ Па, $\bar{\lambda} = 4 \cdot 10^9$ Па, $\mu = 2 \cdot 10^{10}$ Па, $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^{11}$ Па, $\phi_0^* = 2960$ Дж/м³, $\phi_1 = 145920$ Дж/м³, $\phi_2 = 13107200$ Дж/м³, $\alpha = 10$ Дж·К⁻¹/м³, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$ с, $n = -7 \cdot 10^5$ Па. На рис. 5.10 показаны рассчитанные зависимости стационарных значений квадрата параметра порядка, соответствующие потенциалу (5.19) от температуры T и скорости сдвига V (ср. с рис. 5.1). Поведение стационарного параметра порядка, показан-

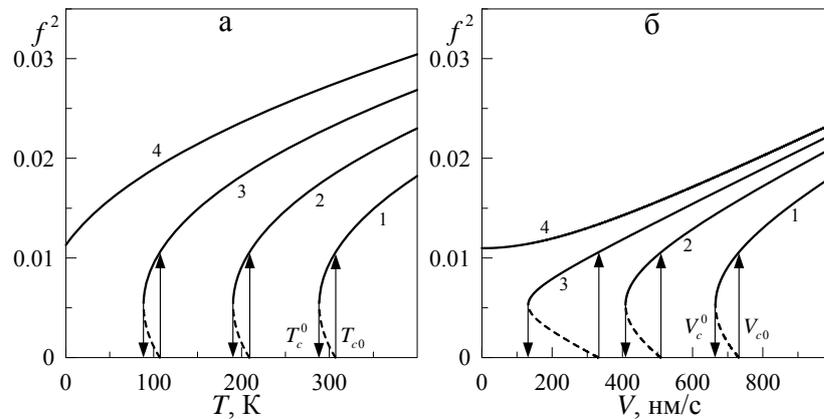


Рис. 5.10. Зависимость стационарного значения квадрата параметра порядка f^2 от температуры T и скорости сдвига V : (а) кривые 1–4 соответствуют скоростям сдвига $V_{1-4} = 0, 700, 1000, 1250$ нм/с; (б) кривые 1–4 построены при температурах $T = 200, 255, 285, 310$ К.

ное на рис. 5.10, отличается от случая, задающегося несимметричным потенциалом (5.6), который показан на рис. 5.1, поэтому приведем здесь краткое описание процессов, которые показывает рис. 5.10. При нулевой скорости сдвига и температуре ниже критического значения $T < T_{c0}$ смазка твердоподобна, а избыточный объем принимает нулевое значение (кривая 1, рис. 5.10а). Это основное отличие,

которое выражается в том, что здесь избыточный объем в твердоподобном состоянии смазочного материала равен нулю. Такая ситуация соответствует смазочным материалам, состоящим из квазисферических молекул или атомов, поскольку они способны образовывать упорядоченные пространственные структуры, характеризующиеся нулевым избыточным объемом f . При температуре $T = T_{c0}$ избыточный объем скачкообразно увеличивается и смазка переходит в жидкоподобное состояние. Затвердевает она при меньшем значении $T = T_c^0$. С повышением скорости сдвига плавление происходит при меньших температурах. При скорости V выше критического значения смазка вне зависимости от температуры всегда жидкоподобна (кривая 4), поскольку наступает полное плавление за счет сдвига.

На рис. 5.11а приведена зависимость плотности свободной энергии Φ от величины f при параметрах кривой 1 на рис. 5.10а. При малых температурах (верх-

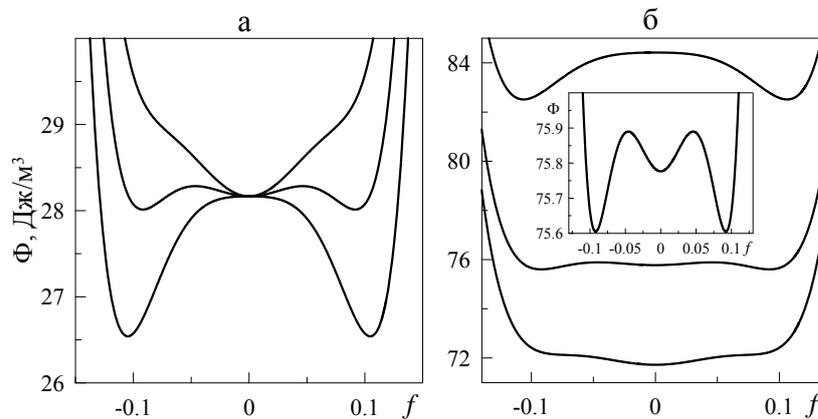


Рис. 5.11. Зависимость плотности свободной энергии Φ (5.19) от параметра f : (а) кривые, расположенные сверху вниз, соответствуют температурам $T = 280, 295, 310$ К и нулевой скорости сдвига $V = 0$; (б) кривые, расположенные снизу вверх, соответствуют скоростям сдвига $V = 660, 690, 750$ нм/с и температуре $T = 200$ К, на вставке показана увеличенная средняя кривая.

няя кривая) реализуется единственный нулевой минимум потенциала (твердоподобная смазка). При повышении температуры (средняя кривая) появляются два дополнительных симметричных ненулевых минимума, однако система не может перейти в соответствующее им состояние, так как эти минимумы отделены максимумами потенциала от нулевого минимума. При дальнейшем увеличении T разграничивающие максимумы исчезают (нижняя кривая), и смазка резко по меха-

низму фазового превращения первого рода переходит в состояние, соответствующее ненулевому минимуму потенциала, т.е. плавится¹⁷. Если теперь понижать температуру, то при появлении нулевого минимума система не сможет резко перейти в соответствующее ему состояние из-за наличия разграничивающего максимума. С его исчезновением при $T = T_c^0$ смазка скачкообразно затвердеет.

При превышении скоростью сдвига критического значения V_{c0} происходит плавление, а когда $V < V_c^0$, смазка затвердевает (рис. 5.10б). В этом случае реализуется ситуация, схожая с поведением системы при повышении температуры (рис. 5.10а), с тем отличием, что в случае сдвигового плавления с увеличением температуры смазки растет площадь фигуры, ограниченной гистерезисом. С повышением температуры смазка плавится при меньших скоростях сдвига. На рис. 5.11б показан профиль свободной энергии при параметрах кривой 1 на рис. 5.10б. Видно, что он аналогичен профилю энергии при плавлении смазки с повышением температуры T (см. рис. 5.11а).

5.2.3. Сила трения

Зависимости силы трения F (2.30) от температуры T и скорости сдвига V , соответствующие потенциалу (5.19), показаны на рис. 5.12 (ср. с рис. 5.4). Все кри-

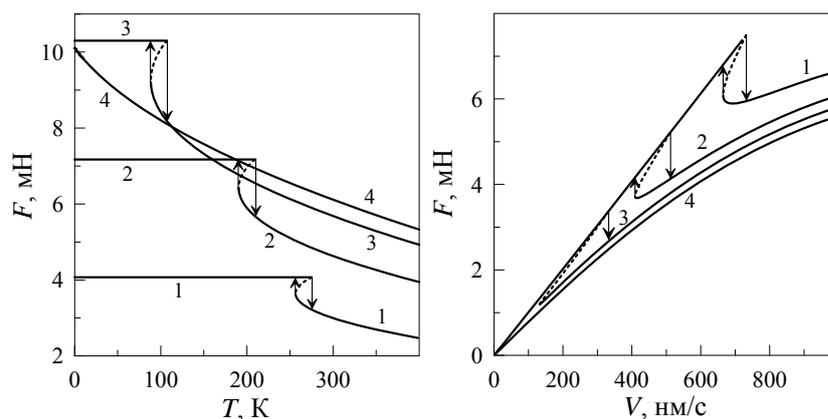


Рис. 5.12. Зависимость силы трения F (2.30) от скорости сдвига V и температуры T при $\gamma = 2/3$, $k = 0,6 \text{ Па}\cdot\text{с}^{5/3}$ и $A = 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$: (а) кривые 1–4 отвечают скоростям $V = 400, 700, 1000, 1250 \text{ нм/с}$; (б) кривые 1–4 соответствуют температурам $T = 200, 255, 285, 310 \text{ К}$.

¹⁷Поскольку в модели наблюдаемой величиной является f^2 , симметричные минимумы потенциала при положительном и отрицательном значении f соответствуют одному и тому же состоянию смазки.

вые на рис. 5.12а соответствуют параметрам кривых на рис. 5.10а, кроме кривой 1. Указанная особенность связана с тем, что на рис. 5.10а первая кривая построена при нулевой скорости сдвига, а в состоянии покоя сила трения равна нулю. Кривые рис. 5.12б все соответствуют параметрам кривых на рис. 5.10б. На третьей кривой переход затвердевания стрелкой не показан, чтобы не загромождать рисунок.

Рис. 5.12а показывает, что при $T > T_{c0}$ с повышением температуры сила трения уменьшается. Это происходит за счет увеличения параметра f , с ростом которого уменьшается эффективный модуль сдвига μ_{eff} (5.22). Когда смазка находится в твердоподобном состоянии, сила трения от температуры не зависит, поскольку в рамках рассматриваемой модели при этом реализуется стационарное значение $f = 0$. При параметрах кривой 4 смазка всегда жидкоподобна, а сила трения уменьшается с температурой за счет уменьшения модуля сдвига.

Согласно рис. 5.12б, при малых скоростях сдвига смазка твердоподобна, и реализуется сухое трение. При этом повышение скорости приводит к росту обоих компонент силы трения F (2.30). Причем упругая составляющая F в этом режиме растет только за счет увеличения упругой компоненты деформации ε_{el} согласно (2.16) при постоянном значении модуля сдвига μ_{eff} (5.22), поскольку $f = 0$. При дальнейшем повышении скорости V смазка плавится, что приводит к резкому снижению силы трения F . С еще большим увеличением скорости значение F возрастает. Согласно кривой 4, показанной на рис. 5.12б, когда смазочный материал находится в жидкоподобном состоянии и реализуется режим скольжения, сила трения F (2.30) растет за счет увеличения вязкой компоненты.

На обоих рисунках до фазового перехода плавления избыточный объем f принимает нулевое значение, что согласно (5.22), (2.30) и (2.16) дает выражение для силы сухого трения в виде

$$F_{solid} = \left(\frac{\mu V \tau_\varepsilon}{h} + k \left(\frac{V}{h} \right)^{\gamma+1} \right) A. \quad (5.25)$$

Согласно (5.25), при постоянной скорости сдвига $V = \text{const}$ сила сухого трения не зависит от температуры, что и видно на рис. 5.12а. Формула (5.25) для кри-

вой 1 на рис. 5.12а дает постоянное значение силы трения $F_{solid} \approx 4,07$ мН, для кривой 2 — $F_{solid} \approx 7,17$ мН, и для кривой 3 — $F_{solid} = 10,3$ мН.

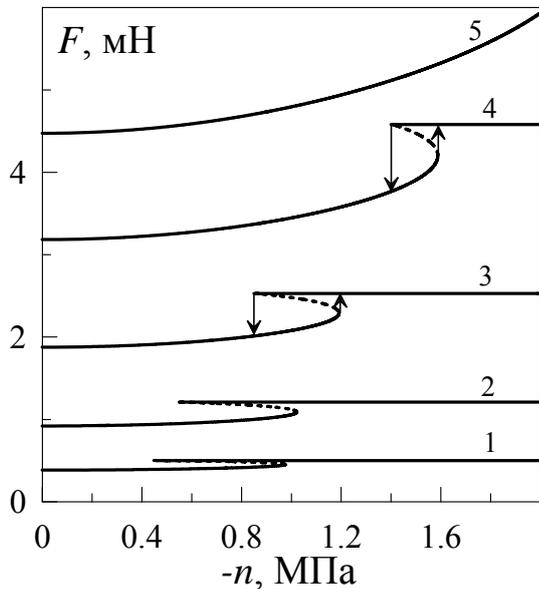


Рис. 5.13. Зависимость силы трения F от нормального давления на поверхности трения $-n$ при параметрах рис. 5.12 и температуре $T = 300$ К. Кривые 1–5 отвечают постоянным значениям скоростей сдвига $V = 50, 120, 250, 450, 700$ нм/с.

нейшее сдавливание поверхностей приводит к ее затвердеванию, и скачкообразному увеличению значения полной силы трения F (фазовый переход), после чего она продолжает увеличиваться монотонно. Если после затвердевания уменьшать нагрузку, смазочный материал снова расплавится, когда напряжения $-n$ станут по абсолютному значению меньше критической величины. При больших скоростях сдвига (кривая 5) смазочный материал в рассматриваемом диапазоне нагрузок всегда жидкоподобен. Значения силы сухого трения F_{solid} , рассчитанные по формуле (5.25), для параметров кривых 1–5 на рис. 5.13, составляют 0,5 мН; 1,21 мН; 2,53 мН; 4,58 мН и 7,17 мН.

5.2.4. Прерывистый режим

В работе [41] проведено исследование кинетики системы, показанной на рис. 1.21, в случае, когда задача определяется симметричным потенциалом (5.19). В работе получены кинетические зависимости основных величин при

На рис. 5.13 приведена численно рассчитанная зависимость полной силы трения F от нормальных напряжений $-n$, действие которых направлено на сжатие трущихся поверхностей (ср. с рис. 5.5). Для кривых 1 и 2 на рисунке переходы плавления и затвердевания стрелками не обозначены, поскольку в этом масштабе плохо видны. Согласно кривым 1–4 смазка при малом значении нормального давления находится в жидкоподобном состоянии, а дальнейшее сдавливание поверхностей приводит к ее затвердеванию, и скачкообразному увеличению значения полной силы трения F (фазовый переход), после чего она продолжает увеличиваться монотонно. Если после затвердевания уменьшать нагрузку, смазочный материал снова расплавится, когда напряжения $-n$ станут по абсолютному значению меньше критической величины. При больших скоростях сдвига (кривая 5) смазочный материал в рассматриваемом диапазоне нагрузок всегда жидкоподобен. Значения силы сухого трения F_{solid} , рассчитанные по формуле (5.25), для параметров кривых 1–5 на рис. 5.13, составляют 0,5 мН; 1,21 мН; 2,53 мН; 4,58 мН и 7,17 мН.

изменении скорости сдвига свободного конца пружины V_0 , температуры смазочного материала T , а также давления на поверхности трения $-n$. Результаты, полученные в работе, качественно воссоздают показанные на рис. 5.6, рис. 5.8 и рис. 5.9. Это говорит о том, что в кинетическом режиме потенциалы (5.6) и (5.19) приводят к одинаковому поведению трибологической системы.

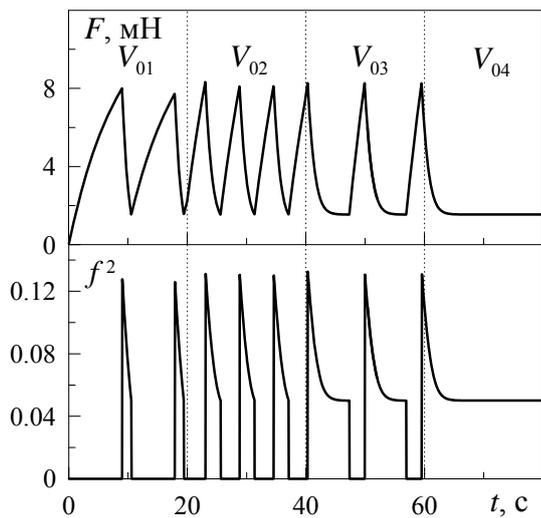


Рис. 5.14. Зависимость силы трения F и квадрата параметра порядка f^2 от времени t при параметрах рис. 5.12, $M = 0,1$ кг, $K = 1200$ Н/м, $T = 250$ К и скоростях сдвига $V_{01-04} = 1200, 2200, 2665, 2670$ нм/с.

Описание рисунка совпадает с приведенным описанием к рис. 5.7, с тем отличием, что в рассматриваемом случае твердоподобному состоянию смазочного материала соответствует нулевое значение параметра порядка $f = 0$. Более того, как это видно из зависимости $f^2(t)$, реализуется другой сценарий поведения динамической системы.

5.3. Связь между параметрами порядка избыточного объема и модуляции плотности

В диссертации разработаны два подхода к описанию процессов граничного трения. В одном из них параметром порядка является периодическая часть микроскопической функции плотности среды φ (модуляция плотности), значение ко-

Однако, потенциал (5.19) описывает системы, в которых твердоподобному состоянию смазочного материала отвечает нулевое значение параметра порядка f (потенциал (5.6) описывает ситуацию, в которой твердоподобной и жидкоподобной смазке отвечают ненулевые значения параметра порядка, отличающиеся по своему значению). Поэтому для общности рассмотрения приведем здесь рисунок, на котором показана эволюция параметра порядка.

На рис. 5.14 показаны зависимости силы трения F (2.30) и квадрата параметра порядка f^2 от времени t при последовательном увеличении скорости сдвига V_0 (ср. с рис. 5.7).

торой уменьшается с плавлением, к чему приводит рост либо температуры T , либо упругих деформаций ε_{el} (разделы 2, 3 и 4 диссертации). Во втором подходе как параметр порядка выбирается избыточный объем f , увеличивающийся при плавлении с повышением температуры и упругих деформаций (разделы 5 и 6 работы). Достоинством такого подхода является то, что он явным образом учитывает влияние внешней нагрузки на поверхности трения, которая вводится через нормальные внешние напряжения $-n$, входящие в выражение для первого инварианта тензора деформаций (5.13). С ростом абсолютной величины n избыточный объем f за счет сдавливания смазочного слоя ограничивающими стенками уменьшается. Причем в рамках второго подхода используются два типа разложения — несимметричное (подраздел 5.1 диссертации) и симметричное (подраздел 5.2). В первом случае описывается фазовый переход между двумя ненулевыми значениями избыточного объема f , а вторая ситуация отвечает системам, в которых упорядоченное твердоподобное состояние смазочного материала соответствует нулевому значению избыточного объема, который становится ненулевым при повышении температуры за счет плавления. В обоих случаях переходы между фазовыми состояниями смазки описаны как фазовые переходы первого рода.

Поскольку оба подхода, хотя и оперируют параметрами порядка, в которые вкладывается различный физический смысл, описывают один и тот же процесс граничного трения, установим связь между параметрами порядка φ и f . Однако, при этом стоит понимать, что поскольку второй подход более общий, он способен описать эффекты, которые описать в рамках первого подхода не представляется возможным.

5.3.1. Симметричный потенциал

Проанализируем в этом подразделе симметричное разложение (5.19), которое рассматривается в подразделе 5.2 диссертации. Для начала следует установить соответствие между параметрами порядка φ и f , что можно легко сделать

из сравнения выражений для сдвиговых напряжений (2.5) и (5.15), что с учетом (5.22) дает связь

$$f^2 = \frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a}{\bar{\mu}} \varphi^2. \quad (5.26)$$

Согласно (5.26), с ростом величины модуляции плотности φ (упорядочением смазочного материала) избыточный объем f уменьшается, на что было указано ранее. Причем максимальное значение избыточного объема $f_{\max} = \sqrt{\mu/\bar{\mu}}$ соответствует полностью разупорядоченной смазке, для которой $\varphi = 0$. Максимальное значение параметра порядка φ легко определить при $f = 0$, и оно составит $\varphi_{\max} = \sqrt{\mu/a}$.

Из сравнения структур кинетических уравнений (2.36) и (5.24) видно, что они могут быть сведены одно к другому переобозначением коэффициентов, если мы формально примем $n = 0$. При $n = 0$ первый инвариант (5.13) $\varepsilon_{ii}^e \equiv 0$, а второй инвариант (5.16) с точностью до постоянной сводится к квадрату упругих сдвиговых деформаций: $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \equiv \varepsilon_{el}^2/2$. При этом разложение (5.19) (без учета градиентного слагаемого) запишется в более простом виде¹⁸

$$\Phi = \Phi_0^* + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 + \left(\phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 - \alpha' T \right) f^2 - \frac{1}{4} \phi_1 f^4 + \frac{1}{6} \phi_2 f^6. \quad (5.27)$$

Используя связь (5.26), запишем свободную энергию (5.27) как функцию параметра порядка φ . После подстановки и приведения подобных получим выражение

$$\begin{aligned} \Phi = & \left[\Phi_0^* - \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1 \mu^2}{4 \bar{\mu}^2} + \frac{\phi_2 \mu^3}{6 \bar{\mu}^3} \right] + \\ & + \varphi^2 \left[\frac{a}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha' T a}{\bar{\mu}} - \frac{a \phi_0^*}{\bar{\mu}} + \frac{a \phi_1 \mu}{2 \bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu^2 a}{2 \bar{\mu}^3} \right] - \\ & - \frac{\varphi^4}{2} \left[\frac{\phi_1 a^2}{2 \bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu a^2}{\bar{\mu}^3} \right] + \frac{\varphi^6}{3} \left[-\frac{\phi_2 a^3}{2 \bar{\mu}^3} \right]. \end{aligned} \quad (5.28)$$

В (5.28) по сравнению с (2.4) появилось первое слагаемое, не зависящее от параметра порядка φ , причем включающее в себя температуру T . Однако, это слагаемое влияет только на уровень отсчета энергии, и не входит в эволюционные уравнения, вид которых определяет кинетику процесса, поэтому такое слагаемое

¹⁸Во избежание недоразумений здесь и далее будем обозначать параметр α , соответствующий изначальному разложению $\Phi(\varphi)$, как α' .

может быть опущено. Из сопоставления выражений (5.28) и (2.4) легко установить соответствия между константами разложения:

$$\alpha = \frac{\alpha' a}{\bar{\mu}}; \quad T_c = \frac{\phi_0^*}{\alpha'} + \frac{\phi_2 \mu^2}{2\bar{\mu}^2 \alpha'} - \frac{\phi_1 \mu}{2\bar{\mu} \alpha'}; \quad (5.29)$$

$$b = \frac{\phi_1 a^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu a^2}{\bar{\mu}^3}; \quad c = -\frac{\phi_2 a^3}{2\bar{\mu}^3}. \quad (5.30)$$

При использовании соотношений (5.29) и (5.30) потенциал (5.28) в точности сводится к выражению (2.4).

На рис. 5.15 показаны зависимости свободной энергии Φ от параметров порядка f и φ . Причем зависимости рассчитаны как непосредственно

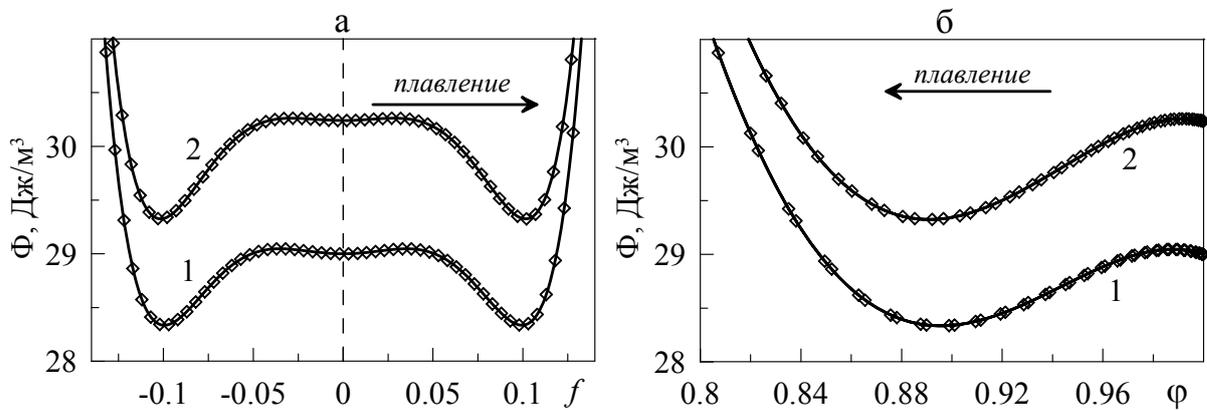


Рис. 5.15. Зависимости свободной энергии Φ от f (а) и φ (б) при параметрах, указанных в подразделе 5.2.2, температуре $T = 270$ К и $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па. Сплошные кривые получены при использовании выражения (5.28), символами показаны зависимости, рассчитанные по формуле (5.27). Кривые 1 соответствуют скорости сдвига $V = 300$ нм/с, кривые 2 — значению $V = 320$ нм/с. Стрелками показано направление увеличения избыточного объема f .

по формуле (5.27) (показаны символами), так и с использованием выражения (5.28) (сплошные линии). Эти кривые совпадают, что подтверждает соответствие выражений (5.27) и (5.28). Однако, в связи с тем, что параметры f и φ связаны соотношением (5.26), и с ростом параметра f величина φ уменьшается, зависимости $\Phi(f)$ и $\Phi(\varphi)$ имеют различный вид. Так, потенциал $\Phi(f)$ является симметричным относительно значения $f = 0$. В рассматриваемом подходе отрицательные значения параметра f не имеют физического смысла, однако поскольку наблюдаемой величиной является f^2 , а потенциал симметричный, исключать отрицательные значения из рассмотрения при численном решении ки-

нетических уравнений нет необходимости. На рис. 5.15б показаны кривые $\Phi(\varphi)$, соответствующие кривым, приведенным на рис. 5.15а. Здесь потенциал согласно выражению (5.28) также является симметричным, однако показана только имеющая физический смысл ветвь $\varphi > 0$. Кроме того, из выражения (5.26) следует, что как положительные, так и отрицательные значения параметра f могут отвечать одной и той же положительной величине φ .

Если для построения кинетических уравнений использовать выражение $\Phi(f)$ (5.27), то необходимо минимизировать энергию по параметру f , и в ходе эволюции система придет к стационарному состоянию, когда параметр порядка f будет соответствовать одному из минимумов $\Phi(f)$, показанных на рис. 5.15а. Причем это будет устойчивое стационарное состояние, поскольку потенциал $\Phi(f)$ устойчивый. Такой анализ проведен в подразделе 5.2 диссертации. Однако, если использовать выражение (5.28), для получения аналогичных результатов необходимо вводить дополнительные ограничения. Потенциал (5.28), как это видно на рис. 5.15б, обладает только одним минимумом, который описывает устойчивое стационарное состояние. Этот минимум на зависимости $\Phi(\varphi)$ соответствует ненулевому минимуму $\Phi(f)$, который показан на рис. 5.15а. Если начальные условия выбирать в окрестности этого минимума, система покажет релаксацию к стационарному значению параметра порядка, соответствующего указанному минимуму. Причем, как это видно из формы кривых на рис. 5.15а и рис. 5.15б, оба подхода будут описывать один и тот же процесс релаксации. Однако, нулевому минимуму на рис. 5.15а и соответствующему значению энергии Φ на рис. 5.15б отвечает не минимум потенциала, а последняя приведенная точка на зависимости $\Phi(\varphi)$. Если дополнительно ничего не предпринимать, то при численном решении кинетических уравнений параметр порядка φ продолжит свое увеличение при достижении указанного значения, поскольку коэффициент при φ^6 в выражении (5.28) отрицательный, что приводит к возникновению неустойчивости. С другой стороны, окончания кривых на рис. 5.15б отвечают нулевому избыточному объему f , и максимально возможному значению модуляции плотности $\varphi_{\max} = \sqrt{\mu/a}$ (см. выражение (5.26)). Поэтому, при использовании

потенциала (5.28) с параметрами (5.29) и (5.30), мы получим те же результаты, что и в подразделе 5.2, если при численном моделировании введем дополнительное условие: если $\varphi > \sqrt{\mu/a}$, то $\varphi = \sqrt{\mu/a}$. При использовании такого условия значение параметра порядка φ никогда не превысит максимально допустимое. При использовании потенциала (5.27) учет подобного условия не требуется, поскольку нулевой минимум потенциала согласно структуре уравнений является устойчивым, что также видно по форме кривых на рис. 5.15а.

Рассмотрим более подробно причину возникновения описанной выше неустойчивости потенциала $\Phi(\varphi)$. Для этого проанализируем стационарные состояния, описываемые потенциалами $\Phi(f)$ (5.27) (рис. 5.16а и 5.16б) и $\Phi(\varphi)$ (2.4) (рис. 5.16в и 5.16г). На рис. 5.16а показана зависимость стационар-

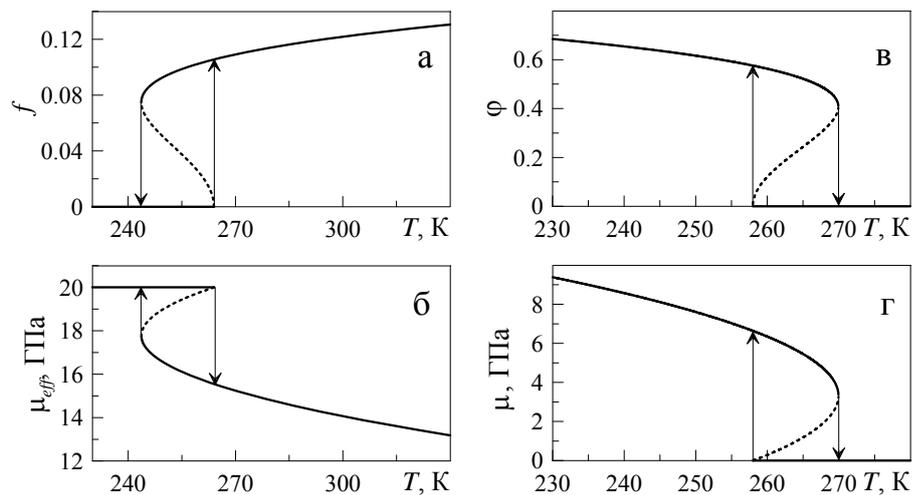


Рис. 5.16. (а) стационарные значения параметра порядка f , соответствующие потенциалу $\Phi(f)$ (5.27) при параметрах рис. 5.15 и $V = 400$ нм/с; (б) стационарные значения эффективного модуля сдвига μ_{eff} (5.22), соответствующие рис. 5.16а; (в) стационарные значения параметра порядка φ (2.8), соответствующие потенциалу $\Phi(\varphi)$ (2.4) при параметрах рис. 2.4 и $V = 400$ нм/с; (г) стационарные значения модуля сдвига $\mu = a\varphi^2$ (2.6), соответствующие рис. 5.16в.

ного значения параметра порядка f от температуры смазочного материала T при фиксированной скорости сдвига V для потенциала $\Phi(f)$ (5.27), а на рис. 5.16б — соответствующая зависимость эффективного модуля сдвига смазочного материала μ_{eff} (5.22). На рис. 5.16в и рис. 5.16г показаны аналогичные зависимости для потенциала $\Phi(\varphi)$ (2.4). Из указанных рисунков следует, что потенциалы (5.27) и (2.4) описывают системы, поведение которых отличается при повышении тем-

пературы T . Так, потенциал $\Phi(f)$ (5.27) описывает ситуацию, когда твердopodobное состояние смазочного материала характеризуется постоянным значением модуля сдвига μ_{eff} , которое скачкообразно уменьшается с повышением температуры до точки фазового перехода, после чего в жидкоподобном состоянии смазки модуль сдвига монотонно уменьшается. Потенциал $\Phi(\varphi)$ (2.4) описывает иную ситуацию, в которой модуль сдвига монотонно уменьшаются в твердopodobном состоянии, а после фазового перехода плавления он равен нулю. В первом случае (рис. 5.16а и 5.16б) осуществляется переход между ”идеальным“ кристаллом и жидкоподобной структурой, имеющей признаки твердого тела (ненулевой модуль сдвига, который с дальнейшим повышением температуры уменьшается и становится нулевым). Во втором случае (рис. 5.16в и 5.16г) твердopodobная структура смазки имеет дефекты, количество которых растет с повышением температуры, поскольку модуль сдвига уменьшается, а после плавления смазочный слой становится ”идеальной“ жидкостью, поскольку в расплавленном состоянии модуль сдвига $\mu = 0$. Таким образом, потенциал $\Phi(f)$ (5.27) описывает переход между ”идеальным“ кристаллом и вязко-упругой смазкой, а выражение $\Phi(\varphi)$ (2.4) — переход между вязко-упругой смазкой и ”идеальной“ жидкостью.

Несмотря на приведенное выше объяснение тот факт, что потенциал (5.28) является неустойчивым, может быть воспринят как некое противоречие. Этот потенциал соответствует симметричному разложению (5.27), которое описывает фазовый переход первого рода между нулевым и ненулевым значениями избыточного объема f . В подразделах 2.2 и 2.3 диссертационной работы показано, что симметричный и несимметричный потенциалы качественно дают похожие результаты. Это позволяет говорить о том, что потенциал типа (5.28), содержащий третий инвариант, описывает аналогичное поведение с рассмотренным случаем симметричного разложения, как это было также показано в экспериментальной работе [180]. По аналогии с выражениями (5.27) и (2.46) искомое несимметрич-

ное разложение свободной энергии $\Phi(f)$ запишется в виде

$$\Phi = \Phi_0^* + \frac{\mu}{2}\varepsilon_{el}^2 + \left(\phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2}\varepsilon_{el}^2 - \alpha'T\right)f^2 - \frac{1}{3}\phi_1f^3 + \frac{1}{4}\phi_2f^4, \quad (5.31)$$

которое дает записанную выше связь между параметрами порядка (5.26). Подстановка (5.26) в выражение (5.31) дает эквивалентный потенциал $\Phi(\varphi)$ в виде

$$\begin{aligned} \Phi = & \left[\Phi_0^* - \frac{\alpha'T\mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_0^*\mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_2\mu^2}{4\bar{\mu}^2} \right] - \varphi^2 \frac{a}{\bar{\mu}} \left[\phi_0^* - \frac{\bar{\mu}\varepsilon_{el}^2}{2} - \alpha'T + \frac{\phi_2\mu}{2\bar{\mu}} \right] - \\ & - \frac{\phi_1}{3} \left(\frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a\varphi^2}{\bar{\mu}} \right)^{3/2} + \frac{\varphi^4}{4} \left[\frac{\phi_2a^2}{\bar{\mu}^2} \right], \end{aligned} \quad (5.32)$$

который согласно математической структуре является устойчивым, поскольку коэффициент разложения при наивысшей степени φ^4 положительный. Стоит отметить, что потенциал (5.32) содержит нецелые степени параметра порядка, однако с использованием разложения третьего слагаемого в ряд

$$\left(\frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a\varphi^2}{\bar{\mu}} \right)^{3/2} = \left(\frac{\mu}{\bar{\mu}} \right)^{3/2} - \frac{3}{2} \frac{(\mu/\bar{\mu})^{3/2}}{\mu} a \varphi^2 + \frac{3}{8} \frac{(\mu/\bar{\mu})^{3/2}}{\mu^2} a^2 \varphi^4 + O(\varphi^6) \quad (5.33)$$

сводится к полиномиальному виду, сохраняя при этом устойчивую форму, поскольку все слагаемые высших порядков в (5.33) положительные.

На рис. 5.17 показаны стационарные значения параметров порядка f и φ , а также модуля сдвига μ как функции температуры T , соответствующие потенци-

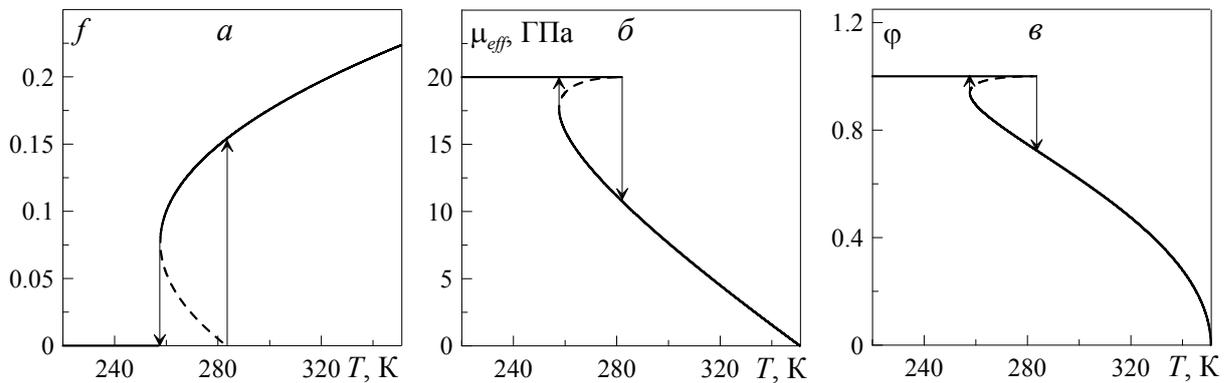


Рис. 5.17. (а) стационарные значения параметра порядка f , соответствующие потенциалу $\Phi(f)$ (5.31) при параметрах рис. 5.16 и $\phi_0^* = 1700$ Дж/м³, $\phi_1 = 8000$ Дж/м³, $\phi_2 = 52000$ Дж/м³, $\phi_3 = 1293750$ Дж/м³, $\alpha = 6$ Дж·К⁻¹/м³, $V = 0$ нм/с; (б) стационарные значения модуля сдвига μ_{eff} (5.22), соответствующие рис. 5.17а; (в) стационарные значения параметра порядка φ , соответствующие потенциалу $\Phi(\varphi)$ (5.32) при параметрах рис. 5.17а и $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па.

алам (5.31) и (5.32). Качественно ситуация, показанная на рисунке, повторяет ранее рассмотренный случай, проиллюстрированный на рис. 5.16а и рис. 5.16б, а именно, с ростом температуры T модуль сдвига μ до точки плавления $T = T_{c0}$ не изменяется, после чего скачкообразно уменьшается при фазовом переходе первого рода, и продолжает дальнейшее уменьшение при последующем росте температуры. Отличие здесь в том, что потенциал $\Phi(\varphi)$ (5.32) в отличие от выражения (5.28) является устойчивым. Однако, в обоих случаях при выбранных параметрах разложения значения $\varphi > 1$ не имеют физического смысла, поскольку $\varphi = 1$ является максимально возможным значением параметра порядка (см. например формулу (2.9) и ее объяснение).

На рис. 5.18 показаны кривые потенциалов (5.31) и (5.32) как функции соответствующих параметров порядка для трех значений температур. Кривые 1 со-

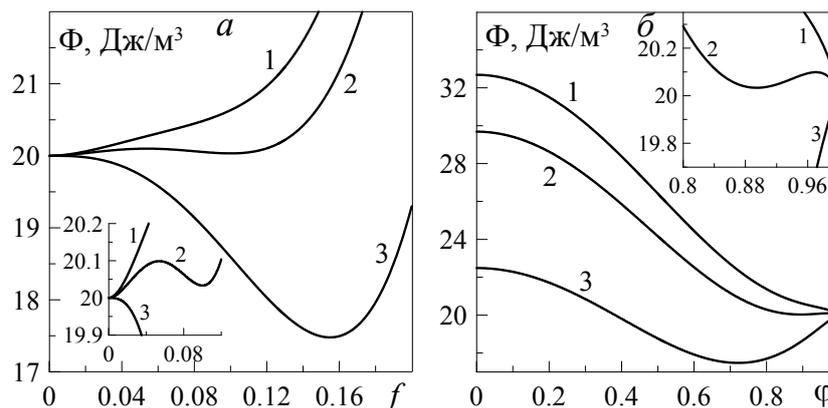


Рис. 5.18. (а) потенциал $\Phi(f)$ (5.31) при параметрах рис. 5.17; (б) потенциал $\Phi(\varphi)$ (5.32) при параметрах рис. 5.17. Кривые 1–3 на обоих рисунках отвечают температурам $T = 250, 260, 284$ К и скорости сдвига $V_0 = 0$ нм/с.

ответствуют твердopodobному состоянию смазочного материала ($T < T_c^0$), кривые 2 построены для температуры T , при которой реализуется область гистерезиса ($T_c^0 < T < T_{c0}$), и кривые 3 иллюстрируют ситуацию, когда смазочный материал жидкоподобен ($T > T_{c0}$), но модуль сдвига при этом ненулевой. Параметры рисунка аналогичны параметрам, при которых построен рис. 5.17, поэтому между ними может быть произведено однозначное соответствие.

5.3.2. Несимметричный потенциал

Проведем анализ, аналогичный представленному в предыдущем подразделе, для несимметричного потенциала $\Phi(f)$ (5.6). В этом случае связь между параметрами порядка f и φ запишется в виде (ср. с (5.26))

$$f = \frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a}{\bar{\mu}}\varphi^2, \quad (5.34)$$

а термодинамический потенциал (5.6) при $n = 0$ примет форму

$$\Phi = \Phi_0^* + \frac{\mu}{2}\varepsilon_{el}^2 - \left(\phi_0^* + \frac{\bar{\mu}}{2}\varepsilon_{el}^2 + \alpha'T\right)f + \frac{1}{2}\phi_1f^2 - \frac{1}{3}\phi_2f^3 + \frac{1}{4}\phi_3f^4. \quad (5.35)$$

Для получения потенциала $\Phi(\varphi)$, эквивалентного выражению $\Phi(f)$ (5.35), необходимо сделать подстановку выражения (5.34) в энергию (5.35). После приведения подобных получим потенциал Φ как функцию модуляции плотности φ в виде

$$\begin{aligned} \Phi = & \left[\Phi_0^* - \frac{\alpha'T\mu}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_0^*\mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1\mu^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2\mu^3}{3\bar{\mu}^3} + \frac{\phi_3\mu^4}{4\bar{\mu}^4} \right] + \\ & + \varphi^2 \left[\frac{a}{2}\varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha'Ta}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_0^*a}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1a\mu}{\bar{\mu}^2} + \frac{\phi_2\mu^2a}{\bar{\mu}^3} - \frac{\phi_3\mu^3a}{\bar{\mu}^4} \right] + \\ & + \varphi^4 \left[\frac{\phi_1a^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2\mu a^2}{\bar{\mu}^3} + \frac{3\phi_3\mu^2a^2}{2\bar{\mu}^4} \right] - \\ & - \varphi^6 \left[-\frac{\phi_2a^3}{3\bar{\mu}^3} + \frac{\phi_3\mu a^3}{\bar{\mu}^4} \right] + \varphi^8 \left[\frac{\phi_3a^4}{4\bar{\mu}^4} \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

На рис. 5.19 показаны кривые, рассчитанные по формулам (5.34)–(5.36). Видно, что потенциалы $\Phi(f)$ и $\Phi(\varphi)$ являются устойчивыми. Это связано с тем, что в рассматриваемом случае описывается ситуация, когда происходят переходы между двумя структурными состояниями смазочного материала, которым соответствуют ненулевые значения параметров порядка f и φ (и, соответственно, модулей сдвига), что также следует из рис. 5.1. Такой случай может быть описан аналогичным образом как при использовании в качестве параметра порядка избыточного объема f , так и модуляции плотности φ . Единственное отличие здесь в том, что потенциал (5.35) несимметричный, а эквивалентный ему потенциал (5.36) уже симметричный, поскольку параметры порядка связаны нелинейным соотношением (5.34). Однако, поскольку в обоих случаях отрицательные значения па-

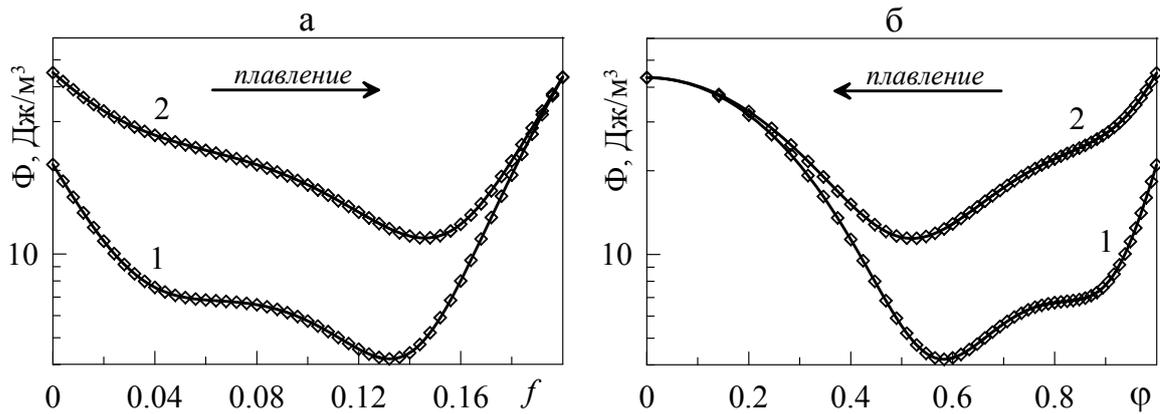


Рис. 5.19. Зависимости свободной энергии Φ от f (а) и φ (б) при параметрах, указанных в подразделе 5.1.3, температуре $T = 290$ К и $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па. Сплошные кривые получены при использовании выражения (5.35), символами показаны зависимости, рассчитанные по формуле (5.36). Кривые 1 соответствуют скорости сдвига $V = 100$ нм/с, кривые 2 – значению $V = 500$ нм/с.

раметров порядка не имеют физического смысла, это не нарушает математической структуры уравнений при переходе от одного описания к другому, и они полностью эквивалентны. Еще раз отметим, что в рассматриваемом случае оба потенциала устойчивы, поскольку описывают одну и ту же ситуацию фазового перехода первого рода между двумя состояниями с ненулевыми значениями модуля сдвига, и введение дополнительных условий, как в подразделе 5.3.1 диссертации, здесь не требуется.

5.3.3. Фазовый переход второго рода

Ранее указывалось, что влияние нагрузки на поверхности трения при использовании потенциала $\Phi(\varphi)$ типа (2.4) может быть учтено при вариации коэффициентов разложения. Определим здесь, каким образом их следует при этом варьировать. Для начала рассмотрим фазовый переход второго рода. В этом случае можно использовать конструкцию вида (ср. с (5.19))

$$\Phi = \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2 + \left[\phi_0^* - \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha'T \right] f^2 + \frac{1}{4}\phi_1 f^4, \quad (5.37)$$

где коэффициент при f^2 меняет знак на отрицательный при повышении температуры либо упругих деформаций, что приводит к плавлению, поскольку стационарное значение параметра порядка f становится при этом ненулевым.

Рассмотрим сначала упрощенный случай $n = 0$, в котором потенциал (5.37) сводится к выражению

$$\Phi = \frac{\mu}{2}\varepsilon_{el}^2 + \left(\phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2}\varepsilon_{el}^2 - \alpha'T\right)f^2 + \frac{1}{4}\phi_1f^4. \quad (5.38)$$

В случае, описываемом потенциалом (5.38), эффективный модуль сдвига μ_{eff} определяется формулой (5.22), что дает связь между параметрами порядка в виде (5.26), и приводит к эквивалентному потенциалу $\Phi(\varphi)$ вида

$$\Phi = \left[\frac{\phi_0^*\mu}{\bar{\mu}} - \frac{\alpha'T\mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1\mu^2}{4\bar{\mu}^2}\right] + \varphi^2 \left[\frac{a}{2}\varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha'Ta}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_0^*a}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1a\mu}{2\bar{\mu}^2}\right] + \varphi^4 \left[\frac{\phi_1a^2}{4\bar{\mu}^2}\right]. \quad (5.39)$$

Зависимости $\Phi(f)$ (5.38) и $\Phi(\varphi)$ (5.39) показаны на рис. 5.20. На рис. 5.20б

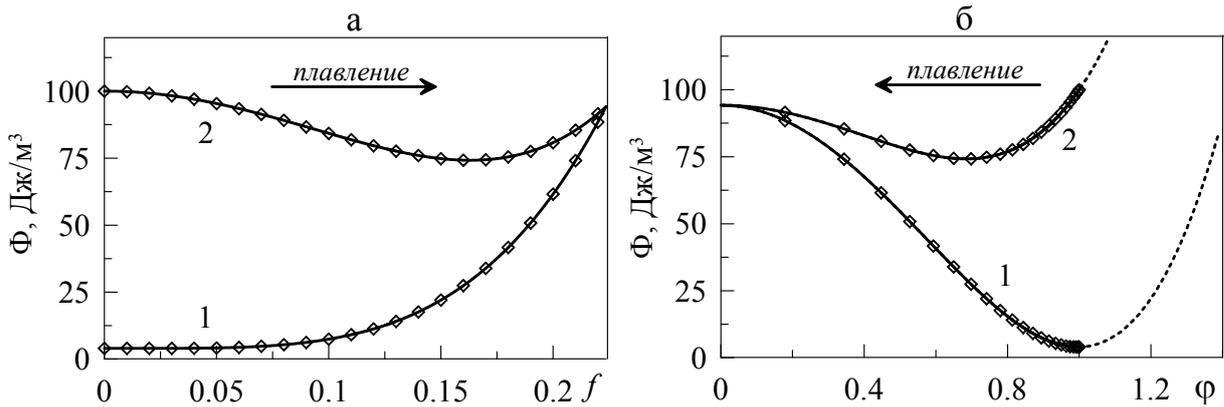


Рис. 5.20. Зависимости свободной энергии Φ от f (а) и φ (б) при параметрах, указанных в подразделе 5.2.2, температуре $T = 290$ К и $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па. Сплошные кривые получены при использовании выражения (5.38), символами показаны зависимости, рассчитанные по формуле (5.39). Кривые 1 соответствуют скорости сдвига $V = 200$ нм/с, кривые 2 – значению $V = 1000$ нм/с.

пунктирными линиями показаны продолжения ветвей потенциала $\Phi(\varphi)$ в области $\varphi > \sqrt{\mu/a}$, в которой согласно (5.26) квадрат избыточного объема $f^2 < 0$, что не имеет физического смысла. Рис. 5.20 иллюстрирует непрерывный фазовый переход второго рода между состояниями со значениями $f = 0$ и $f > 0$. В то время как на зависимости на рис. 5.20а реализуется нулевой минимум потенциала, на рис. 5.20б согласно связи (5.26) устанавливается стационарное значение $\varphi = \sqrt{\mu/a}$. Это значение является устойчивым, поскольку, как это видно из рисунка, соответствует минимуму потенциала. В рассматриваемом случае оба

представления свободной энергии Φ являются устойчивыми, и не возникает необходимости введения дополнительного ограничивающего условия, как в подразделе 5.3.1. Несмотря на это, потенциалы (5.38) и (2.69), соответствующие реализации фазового перехода второго рода, описывают физически различные ситуации, которые были подробно рассмотрены в подразделе 5.3.1. Стационарные значения при этом будут схожи по форме с приведенными на рис. 5.16, с тем отличием, что гистерезис на зависимостях заменит непрерывный переход.

5.3.4. Влияние внешней нагрузки

5.3.4.1. Фазовый переход второго рода

Рассмотрим на примере потенциала (5.37) переход от параметра порядка f к параметру порядка φ в случае, когда внешние нормальные напряжения n не равны нулю. При этом будем искать потенциал $\Phi(\varphi)$, соответствующий выражению (5.37), в виде степенного ряда. В разложение (5.37) входит квадрат первого инварианта (5.13), который в рассматриваемом случае может быть представлен в виде степенного ряда

$$(\varepsilon_{ii}^e)^2 = \left(\frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}} \right)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} \sum_{\tilde{k}=0}^{\infty} (\tilde{k} + 1) \left(\frac{\bar{\lambda} + \bar{\mu}}{\lambda + \mu} \right)^{\tilde{k}} f^{2\tilde{k}}. \quad (5.40)$$

Точность описания функции $(\varepsilon_{ii}^e)^2$ с помощью ряда (5.40) повышается с количеством используемых в этом ряде слагаемых, и в пределе $\tilde{k} \rightarrow \infty$ функция описывается с помощью ряда точно. Однако, изначальное разложение (5.37) содержит максимальную степень f^4 , поэтому для соответствия математических конструкций потенциалов остановимся на второй степени, что соответствует значениям $\tilde{k} = 0, \tilde{k} = 1$. При этом ряд (5.40) даст функцию

$$(\varepsilon_{ii}^e)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} + \frac{2n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda + \mu)^3} f^2 + O(f^4). \quad (5.41)$$

Второй инвариант (5.14), согласно выражению (5.16), с точностью до постоянного множителя сводится к сумме первого инварианта и квадрата упругой сдвиговой деформации. Поэтому (5.41) – единственная необходимая ап-

проксимация, при использовании которой можно записать степенное разложение свободной энергии. Перед тем, как получить такое разложение,

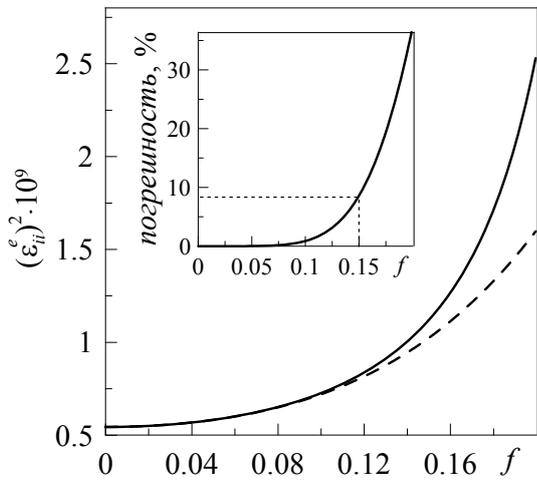


Рис. 5.21. Зависимость квадрата первого инварианта (5.13) (сплошная кривая) и аппроксимация (5.41) без учета $O(f^4)$ при параметрах, приведенных в подразделе 5.2.2. На вставке показано отклонение зависимостей, выраженное в процентах, где за 100% берется значение, определяемое формулой (5.13).

определим область применимости аппроксимации (5.41). На рис. 5.21 сплошной линией показана зависимость, рассчитанная непосредственно по формуле (5.13), а штриховой — степенная аппроксимация (5.41). Из вставки к рисунку следует, что степенная аппроксимация (5.41) с высокой точностью описывает функцию (5.13) в области $f < 0.1$, и это

более чем достаточно для описания фазового перехода второго рода. В области $f < 0.15$ аппроксимация показывает ошибку менее 9%. Из рис. 5.1 следует, что этой области также достаточно и для описания фазового перехода первого рода. Более того, при необходимости всегда можно добиться сколь угодно высокой точности, учитывая в (5.40) слагаемые более высоких порядков.

Подстановка выражений (5.41) и (5.16) в потенциал (5.37) приводит к формуле

$$\begin{aligned} \Phi = & \frac{\mu}{2}\varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2}{2(\lambda + \mu)} + f^2 \left[\phi_0^* - \alpha'T - \frac{\bar{\mu}}{2}\varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{2(\lambda + \mu)^2} \right] + \\ & + f^4 \left[\frac{\phi_1}{4} - \frac{n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})^2}{(\lambda + \mu)^3} \right], \end{aligned} \quad (5.42)$$

которая согласно рис. 5.21 с высокой точностью описывает изначальный потенциал (5.37) в области значений параметра порядка $f < 0.1$, т.е. вблизи точки фазового перехода второго рода. Этой области достаточно для описания прерывистого режима движения, который может существовать, как это показано в работе [39], и в случае фазового перехода второго рода. Перейдем теперь от параметра порядка избыточного объема f к модуляции плотности φ . После подстановки

связи (5.26) в выражение (5.42), получим свободную энергию как функцию параметра порядка φ в виде

$$\begin{aligned} \Phi = & \left[\frac{n^2 \lambda}{2(\lambda + \mu)^2} + \frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1 \mu^2}{4\bar{\mu}^2} + \frac{n^2 \lambda \mu}{(\lambda + \mu)^3} + \frac{n^2 \lambda \bar{\lambda} \mu}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} - \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} - \right. \\ & \left. - \frac{n^2 \bar{\lambda} \mu}{2(\lambda + \mu)^2 \bar{\mu}} - \frac{n^2 \bar{\lambda} \mu^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} - \frac{n^2 \bar{\lambda}^2 \mu^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}^2} \right] + \\ & + \varphi^2 \left[\frac{a}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2 a}{2(\lambda + \mu)^2} - \frac{n^2 \lambda \bar{\lambda} a}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} - \frac{\phi_0^* a}{\bar{\mu}} + \frac{n^2 \mu a}{(\lambda + \mu)^3} - \frac{n^2 \lambda a}{(\lambda + \mu)^3} + \right. \\ & \left. + \frac{n^2 \bar{\lambda} a}{2(\lambda + \mu)^2 \bar{\mu}} + \frac{3n^2 \mu \bar{\lambda} a}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} + \frac{2n^2 \bar{\lambda}^2 \mu a}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}^2} + \frac{\alpha' T a}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1 \mu a}{2\bar{\mu}^2} \right] + \\ & + \varphi^4 \left[\frac{\phi_1 a^2}{4\bar{\mu}^2} - \frac{n^2 a^2}{(\lambda + \mu)^3} - \frac{n^2 \bar{\lambda}^2 a^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}^2} - \frac{2n^2 \bar{\lambda} a^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} \right], \end{aligned} \quad (5.43)$$

которая при $n = 0$ сводится к потенциалу (5.39). Несмотря на то, что потенциал (5.43) визуально имеет сложный вид, при фиксированных постоянных разложения от выражения (5.39) он отличается всего лишь тем, что при каждой степени разложения дополнительно появляется слагаемое, пропорциональное квадрату нормальных напряжений n^2 , величина которых задает внешнее давление. По математической форме потенциал (5.43) аналогичен выражению (2.69), которое также описывает фазовый переход второго рода. Но, как это указано выше, эти два потенциала описывают физически различные ситуации. Однако, одинаковая математическая форма указывает на то, что возможно модифицировать выражение (2.69) таким образом, чтобы оно учитывало влияние давления на поверхности трения. Этот вопрос выходит за рамки настоящей диссертационной работы, поскольку предполагает проведение дополнительного обширного исследования.

На рис. 5.22 сплошными линиями показаны зависимости свободной энергии $\Phi(f)$ и $\Phi(\varphi)$, рассчитанные с использованием точного выражения (5.37), а символами — те же зависимости, однако соответствующие аппроксимациям (5.43) и (5.42). Из рисунка следует, что в области фазового перехода предложенные аппроксимации удовлетворительно описывают переход плавления, следствием которого в динамической системе является установление прерывистого режима движения трущихся поверхностей. Это в очередной раз показывает, что влияние давления на поверхности трения может быть учтено при соответствующем

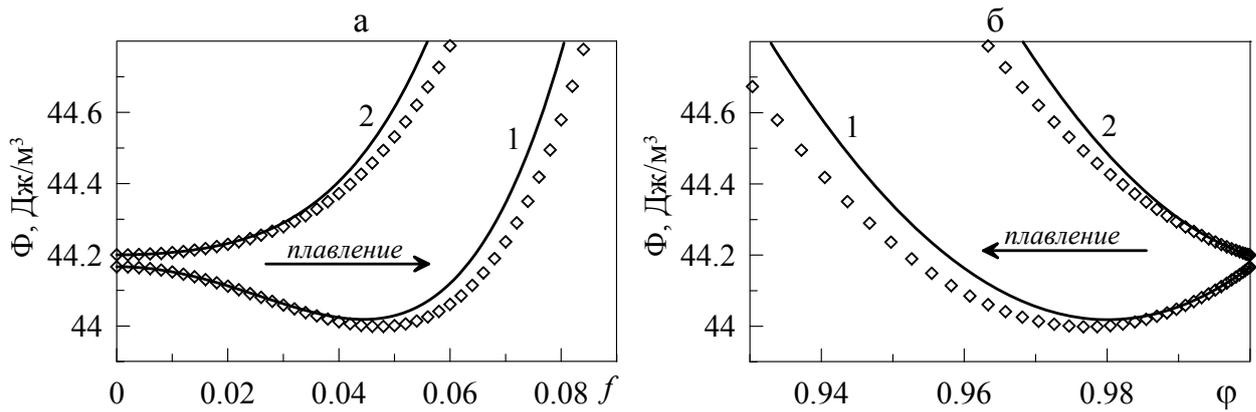


Рис. 5.22. Зависимости свободной энергии Φ от f (а) и от φ (б) при параметрах рис. 5.20 и $T = 250$ К, $V = 600$ нм/с. Сплошные кривые соответствуют выражению (5.37), показанные символами — выражению (5.43). Для кривых 1 напряжения $n = -7 \cdot 10^5$ Па, для кривых 2 — $n = -1,2 \cdot 10^6$ Па. Кривые под номером 2 на обоих рисунках смещены вниз на величину $15,8$ Дж/м³.

щей модификации констант разложения в потенциале $\Phi(\varphi)$ (2.4). Однако, ошибка, которую вносит использование выражения (5.41), существенно растет с увеличением параметра порядка f , поэтому в общем случае при удалении от точки фазового перехода двух слагаемых в (5.41) недостаточно. С другой стороны, кривая 1 на рис. 5.22 показывает хорошее совпадение истинного выражения для свободной энергии с его аппроксимацией. Эта кривая построена при малых значениях внешнего давления. Поэтому, в диапазоне малых значений нагрузок на контактирующие поверхности потенциал типа (2.4) описывает процессы, происходящие при граничном трении, довольно точно. При росте внешнего нагружения можно использовать выражение типа (5.43), однако с его увеличением погрешность такого описания будет увеличиваться, поскольку с ростом давления коэффициенты разложения в (5.43) становятся зависимы от квадрата напряжений n^2 нелинейно, что согласно (5.40) приводит к появлению в (5.43) более высоких степеней разложения. Однако, в любом случае поведение системы можно одинаково описать как при использовании в качестве параметра порядка модуляции плотности φ , так и избыточного объема f , поскольку согласно соотношению (5.26) они однозначно переходят один в другой.

5.3.4.2. Фазовый переход первого рода

Рассмотрим потенциал (5.6), согласно которому связь между параметрами порядка f и φ дается выражением (5.34). При этом первый инвариант (5.13) с учетом (5.11), (5.12) запишется в виде степенного ряда (ср. с (5.40))

$$(\varepsilon_{ii}^e)^2 = \left(\frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}} \right)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} \sum_{\tilde{k}=0}^{\infty} (\tilde{k} + 1) \left(\frac{\bar{\lambda} + \bar{\mu}}{\lambda + \mu} \right)^{\tilde{k}} f^{\tilde{k}}, \quad (5.44)$$

который с ограничением разложения по параметру f до третьей степени дает (ср. с (5.41))

$$(\varepsilon_{ii}^e)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} + \frac{2n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda + \mu)^3} f + \frac{3n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})^2}{(\lambda + \mu)^4} f^2 + \frac{4n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})^3}{(\lambda + \mu)^5} f^3 + O(f^4). \quad (5.45)$$

Подстановка (5.45) с отбрасыванием $O(f^4)$ в выражение (5.6) дает зависимость для свободной энергии в виде полиномиальной аппроксимации 4-й степени (ср. с (5.42))

$$\begin{aligned} \Phi = & \Phi_0^* + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2}{2(\lambda + \mu)} - f \left[\phi_0^* + \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 + \alpha T - \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{2(\lambda + \mu)^2} \right] + \\ & + f^2 \left[\frac{\phi_1}{2} + \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})^2}{2(\lambda + \mu)^3} \right] - f^3 \left[\frac{\phi_2}{3} - \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})^3}{2(\lambda + \mu)^4} \right] + f^4 \left[\frac{\phi_3}{4} - \frac{2n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})^4}{(\lambda + \mu)^5} \right]. \end{aligned} \quad (5.46)$$

Если в выражение (5.46) вместо f подставить связь (5.34), получим потенциал $\Phi(\varphi)$, схожий по форме с (5.36), с тем отличием, что постоянные разложения будут включать слагаемые, зависящие от давления. Указанный потенциал имеет громоздкий вид, поэтому в явном виде его здесь не приводим.

На рис. 5.23 сплошными линиями показаны зависимости свободной энергии $\Phi(f)$ и $\Phi(\varphi)$, рассчитанные с использованием изначального выражения (5.6), а символами — зависимости при тех же параметрах, соответствующие аппроксимации (5.46). На рисунке показаны 3 случая: кривые 1 — жидкоподобная структура смазочного материала, кривые 3 — твердоподобная структура, и для кривых под номером 2 реализуются два стационарных состояния, которые в динамическом случае могут быть причиной прерывистого режима движения. Как это уже

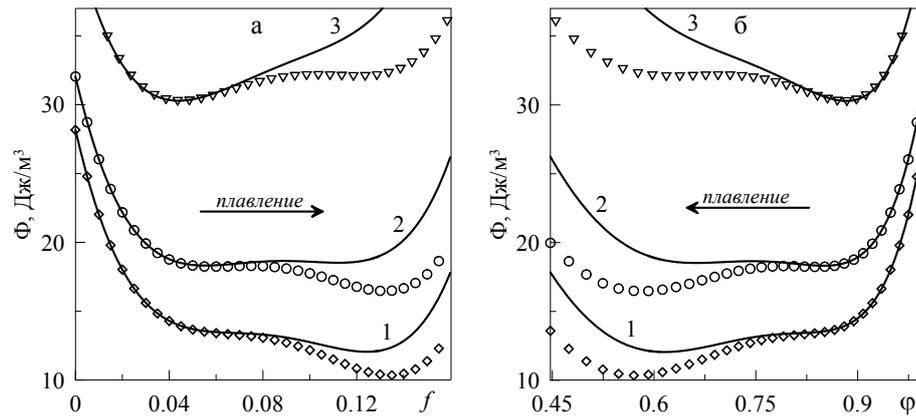


Рис. 5.23. Зависимости свободной энергии Φ от f (а) и φ (б) при параметрах рис. 5.19 и $T = 310$ К, $V = 0$ нм/с. Сплошные кривые соответствуют выражению (5.6), показанные символами – выражению (5.46). Кривые 1–3 отвечают значениям внешних напряжений $n = -7 \cdot 10^5$ Па; $-8,5 \cdot 10^5$ Па и $-1,15 \cdot 10^6$ Па, соответственно.

было указано выше, при малых значениях внешнего давления зависимости хорошо совпадают, а при повышении нагрузки погрешность в области жидкоподобной структуры смазочного материала при больших значениях параметра порядка f становится существенной. Однако, в выбранном на рисунке диапазоне нормальных внешних напряжений при использовании полиномиальной аппроксимации (5.46) возможно описание фазового перехода первого рода с приемлимой точностью. Таким образом, на примерах фазового перехода первого и второго рода показано, что подход, разработанный в разделах 2, 3 и 4 диссертации, справедлив для малых внешних нагрузок на трущиеся поверхности. Причем при увеличении нагрузки ее влияние может быть учтено вариацией значений констант разложения. Однако, при дальнейшем увеличении внешнего нагружения для точного описания поведения системы необходимо учитывать более высокие степени разложения свободной энергии (исчезающие при $n = 0$), чтобы свести к минимуму ошибку, возникающую при использовании аппроксимационного выражения для первого инварианта (5.41), либо (5.45), в зависимости от рассматриваемой задачи. Поскольку мощности современных компьютеров позволяют учитывать любое количество слагаемых разложения типа (5.41), численное моделирование процесса граничного трения в рассматриваемом случае вообще не представляет никакой сложности.

5.4. Выводы к разделу 5

1. Для описания фазового состояния граничной смазки введен параметр порядка, представляющий избыточный объем, значение которого связывается с наличием в смазке дефектов и неоднородностей. При анализе зависимостей динамической силы трения от приложенного к поверхностям давления, температуры смазки и скорости сдвига показано, что рост давления приводит к вынужденному упорядочению и затвердеванию смазочного материала.

2. Показано, что в случае симметричного разложения свободной энергии по степеням параметра порядка упорядоченное состояние смазки отвечает нулевому избыточному объему (кристаллическое состояние при отсутствии структурных дефектов). Такая ситуация реализуется, когда смазочный слой состоит из квазисферических молекул, способных образовывать упорядоченные структуры. В случае несимметричного разложения ненулевое значение избыточного объема отвечает как жидкоподобной, так и твердоподобной смазке, и в обоих фазах избыточный объем растет со скоростью сдвига и температурой. Такое описание справедливо для смазок, состоящих из полимерных молекул, которые неспособны полностью упорядочиваться при низких температурах либо больших нагрузках. В обеих ситуациях проанализированы зависимости силы трения от скорости сдвига, температуры и давления, приложенного к трущимся поверхностям.

3. Сравнение предложенного в разделе подхода к описанию граничного трения с предыдущими (см. разделы 2, 3 и 4 диссертационной работы) показывает, что в некоторых ситуациях оба подхода могут с точностью переходить один в другой, указаны соответствующие случаи. Однако, в общем случае эти два подхода описывают физически различные системы, поскольку по-разному интерпретируют переходы между стационарными значениями модуля сдвига в точке фазового перехода, поэтому не являются эквивалентными.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в статьях [45, 49, 50, 52, 53], статьях в материалах конференций [60, 62] и тезисах докладов на конференциях [64, 80, 82].

РАЗДЕЛ 6

НЕРАВНОВЕСНАЯ ЭВОЛЮЦИОННАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ

В самом общем случае процессы граничного трения, рассматриваемые в данной работе, являются неравновесными, а трибологическая система — неоднородной. Учет неоднородности был проведен в предыдущих разделах диссертационного исследования. Неравновесность процессов связана с тем, что они проходят в открытой системе [296, 297], в том смысле, что в процессе трения происходит диссипация механической энергии, за счет чего смазочный материал разогревается и часть тепловой энергии передается поверхностям трения, которые играют роль термостата [298]. Поэтому температура смазочного материала в общем случае не является постоянной величиной, хотя в предыдущих разделах диссертации считается таковой. Это приближение справедливо только в случае, когда время релаксации температуры очень мало, и энергия от разогретой смазки практически мгновенно передается поверхностям трения. В пределе ультратонкой смазки реализуется именно такая ситуация. Второй тип неравновесности связан с тем, что трущиеся поверхности в экспериментах по граничному трению полностью погружены в смазочный материал (см. рис. 1.1). При этом молекулы смазки, находящиеся на границах системы, постоянно переходят из зоны контакта в зону объемной смазки, и наоборот, что также способствует перераспределению энергии в динамической системе. Таким образом, полученные выше результаты нужно описывать, изначально исходя из принципов неравновесной термодинамики. В докторской диссертации Л. С. Метлова [281] развивается концепция неравновесной эволюционной термодинамики (НЭТ), которая позволяет описывать динамические эффекты, происходящие в открытых системах. В предлагаемом разделе диссертации, основываясь на положениях НЭТ [299], проведено обобщение представленного выше подхода термодинамического описания граничного режима трения (проведенное совместно с д.ф.-м.н. Метловым Л. С.) на неравновесные открытые системы.

6.1. Учет влияния температуры поверхностей трения

6.1.1. Внутренняя энергия и стационарные состояния

Запишем разложение для объемной плотности внутренней энергии u по параметру порядка f с учетом вкладов от упругих компонент деформаций ε_{ij}^e , равновесной s и неравновесной \tilde{s} составляющих энтропии в виде [281]

$$u = u_0 + t_0 \tilde{s} - \frac{1}{2} t_1 \tilde{s}^2 + \phi_0 f^2 - \frac{1}{4} \phi_1 f^4 + \frac{1}{6} \phi_2 f^6, \quad (6.1)$$

где величина f представляет, как и ранее, избыточный объем, нулевое значение которого отвечает твердоподобной структуре смазки, а ненулевое — жидкоподобной [45]. Причем, в свою очередь

$$u_0 = u_0^* + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha s^2, \quad (6.2)$$

$$\phi_0 = \phi_0^* - \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha_\phi s^2, \quad (6.3)$$

$$t_0 = t_0^* + \frac{1}{2} \tilde{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \tilde{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2, \quad (6.4)$$

где $\varepsilon_{ii}^e, (\varepsilon_{ij}^e)^2$ — первые два инварианта тензора деформации (см. Приложение А). Неравновесная энтропия \tilde{s} в выражении (6.1) описывает ту часть теплового движения, которая обусловлена неравновесным и неравномерным характером теплового распределения. Именно эта часть энтропии эволюционирует в процессе внешнего воздействия, стремясь к стационарному значению. Равновесная энтропия изменяется во времени за счет релаксации неравновесной энтропии и перехода последней в равновесную подсистему [300, 301].

Разложение внутренней энергии $u(f)$ (6.1) по степеням параметра порядка f совпадает с используемым ранее разложением свободной энергии (5.19), с тем отличием, что в выражении (6.1) вместо температуры T фигурируют равновесная s и неравновесная \tilde{s} энтропии, за счет введения которых далее описывается процесс теплопередачи от смазочного материала к поверхностям трения. В связи с этим для дальнейшего анализа удобно выбрать параметры разложения, эквивалентные используемым ранее для потенциала $\Phi(f)$ (5.19). При этом в случае

равенства нулю неравновесной энтропии $\tilde{s} = 0$ поведение системы, описанное на Рис. 5.10, 5.11, 5.12 и 5.13, сохраняется. Главное отличие здесь в том, что в случае использования выражения (6.1) вместо температуры T управляющим параметром является энтропия s .

Упругие напряжения выражаются через внутреннюю энергию (6.1) (ср. с (5.9)):

$$\frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{ij}^e} \equiv \sigma_{ij}^e = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f^2 + (\tilde{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\tilde{\mu} \varepsilon_{ij}^e) \tilde{s}, \quad (6.5)$$

где ε_{ij}^e — компоненты тензора упругих деформаций. Последнее выражение можно представить в виде эффективного закона Гука (5.10) с эффективными упругими параметрами (ср. с (5.22) и (5.23))

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu} f^2 + \tilde{\mu} \tilde{s}, \quad (6.6)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda} f^2 + \tilde{\lambda} \tilde{s}, \quad (6.7)$$

уменьшающимися с ростом избыточного объема f , растущего при плавлении смазочного слоя.

Стационарные состояния смазки определяются условием $\partial u / \partial f = 0$, приводящим к уравнению

$$\bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha_\phi s^2 = \phi_0^* - \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \frac{1}{2} \phi_1 f^2 + \frac{1}{2} \phi_2 f^4 + \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (6.8)$$

которое удобно представить как функцию $(\varepsilon_{ij}^e)^2 (f, n, s, \tilde{s})$, либо $s (f, n, (\varepsilon_{ij}^e)^2, \tilde{s})$. При анализе уравнения (6.8) упругую сдвиговую деформацию ε_{el} будем определять согласно (5.16) через инварианты:

$$\varepsilon_{el} = \sqrt{2 (\varepsilon_{ij}^e)^2 - (\varepsilon_{ii}^e)^2}. \quad (6.9)$$

На рис. 6.1 показаны фазовые диаграммы состояний смазки в координатах управляющих параметров при $\tilde{s} = 0$, полученные в результате численного анализа уравнений (6.8) и (6.9). Рис. 6.1а представляет собой зависимости критических скоростей V_{c0} , V_c^0 от энтропии системы s . Кривые на этом рисунке можно также интерпретировать как зависимости s_{c0} , s_c^0 от уровня скорости V . Выше кривой $V_{c0} (s_{c0})$ смазка жидкоподобна и реализуется режим жидкостного трения SF .

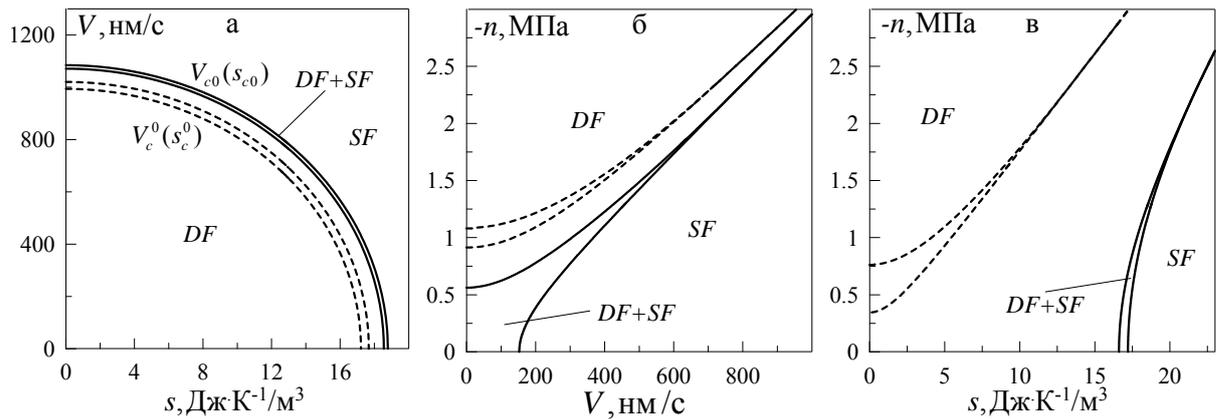


Рис. 6.1. Фазовые диаграммы с областями жидкостного (SF) и сухого (DF) трения при параметрах $\lambda = 10^{10}$ Па, $\bar{\lambda} = 4 \cdot 10^9$ Па, $\mu = 2 \cdot 10^{10}$ Па, $\bar{\mu} = 6 \cdot 10^{11}$ Па, $\phi_0^* = 2960$ Дж/м³, $\phi_1 = 145920$ Дж/м³, $\phi_2 = 13107200$ Дж/м³, $\alpha = 7,9$ К²·м³/Дж, $\alpha_\varphi = 10$ К²·м³/Дж, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$ с и $\tilde{s} = 0$: (а) сплошные линии — $n = -1,3 \cdot 10^6$ Па, штриховые — $n = -7 \cdot 10^5$ Па; (б) сплошные линии — $s = 17$ Дж·К⁻¹·м⁻³, штриховые — $s = 18$ Дж·К⁻¹·м⁻³; (в) сплошные линии — $V = 0$ нм/с, штриховые — $V = 1000$ нм/с.

Потенциал $u(f)$ в этой области подобен виду нижней кривой на рис. 5.11а. Ниже кривой $V_c^0(s_c^0)$ смазка твердоподобна, что соответствует внутренней энергии $u(f)$, вид которой совпадает с верхней кривой на рис. 5.11а. В области между кривыми на рис. 6.1 состояние смазки зависит от начальных условий. Потенциал в указанной области имеет вид, подобный средней кривой на рис. 5.11а. Штриховыми линиями на рисунке показаны области фазовой диаграммы при уменьшенном значении нормальных напряжений. Можно сделать вывод, что с ростом нагрузки на трущиеся поверхности область сухого трения расширяется, а также сужается область гистерезиса, отделяющая указанную область от области жидкоподобного состояния. Внешняя нагрузка, описываемая в нашей модели нормальными напряжениями n , на трибологические системы наноразмеров часто оказывает критическое влияние. Например, в экспериментальной работе [12] показано, что рост нагрузки для одних типов смазок приводит к увеличению критической скорости плавления, а для других смазок эта скорость, наоборот, уменьшается. Также вариации давления приводят к изменению частоты фазовых переходов. Для выяснения влияния внешних напряжений на состояние смазки на рис. 6.1б и рис. 6.1в приведены фазовые диаграммы в координатах давление-

скорость и давление-энтропия соответственно. Из этих диаграмм следует, что с ростом нагрузки на поверхности трения переход смазки из твердоподобного состояния (область DF) в жидкоподобное (область SF) происходит, минуя область гистерезиса ($DF+SF$). Другими словами, при больших значениях внешнего давления фазовый переход первого рода не осуществляется, а вместо него происходит непрерывное плавление смазки по механизму фазового превращения второго рода. В разделе 5 диссертационной работы показано, что рост давления приводит к затвердеванию смазки и увеличению значения полной силы трения, причем в зависимости от значения n может осуществляться фазовый переход как первого, так и второго рода, в то время как при малых значениях внешнего давления модель описывает только фазовый переход первого рода. Ранее подобный подход использовался для описания процессов, происходящих в твердых телах, подверженных действию интенсивных пластических деформаций (ИПД) [302, 303].

6.1.2. Система кинетических уравнений

Обычно в экспериментах фиксируют не энтропию, а ее изменение, рассчитываемое с помощью косвенных измерений. Поэтому гораздо удобней фиксировать температуру смазки, которую можно измерять непосредственно. Температура определяется через внутреннюю энергию (6.1):

$$\frac{\partial u}{\partial s} \equiv T = 2s(\alpha - \alpha_\phi f^2), \quad (6.10)$$

откуда условие положительности температуры дает максимально возможное значение для параметра избыточного объема $f_{\max} = \sqrt{\alpha/\alpha_\phi}$. Аналогичным образом определим эффективную температуру неравновесной подсистемы:

$$\frac{\partial u}{\partial \tilde{s}} \equiv \tilde{T} = t_0 - t_1 \tilde{s}. \quad (6.11)$$

Запишем эволюционные уравнения для неравновесных параметров f и \tilde{s} в виде кинетических уравнений Ландау – Халатникова:

$$\tau_f \dot{f} = -\frac{\partial u}{\partial f}, \quad \tau_s \dot{\tilde{s}} = \frac{\partial u}{\partial \tilde{s}}, \quad (6.12)$$

где постоянные τ_f, τ_s обратны кинетическим коэффициентам. Согласно уравнениям (6.12) внутренняя энергия u по координате f стремится к своему минимальному значению, а по координате \tilde{s} — к максимуму, что соответствует неравновесным процессам [304–307].

Эволюционные уравнения (6.12) в явном виде принимают вид

$$\tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = -2\phi_0 f + \phi_1 f^3 - \phi_2 f^5 - \frac{2n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu}) f}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (6.13)$$

$$\tau_s \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} = t_0 - t_1 \tilde{s}. \quad (6.14)$$

В уравнении (6.14) слагаемое со знаком ”+“ описывает прирост неравновесной энтропии за счет внешних источников энергии (работа), а со знаком ”–“ — ее уход в равновесную подсистему.

Поскольку мы рассматриваем неравновесную открытую систему, для описания процессов теплообмена смазки с окружающей средой необходимо ввести температуру поверхностей трения T_e . В случае неоднородного нагрева среды уравнение теплопроводности представляет обычное уравнение непрерывности [287]

$$T \frac{\partial s}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T, \quad (6.15)$$

где коэффициент теплопроводности κ полагается постоянным. Для упрощения задачи будем считать смазку однородной по плоскости ($\nabla_x^2 = \nabla_y^2 = 0$). Ввиду тонкости смазочного слоя для нормальной составляющей ∇_z^2 с достаточной точностью можно использовать приближение $\nabla_z^2 T \approx (T_e - T)/h^2$, где h — толщина смазки или расстояние между трущимися поверхностями. С учетом этого уравнение (6.15) запишется в более простом виде

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right), \quad (6.16)$$

где величина h^2/κ играет роль времени релаксации, в течение которого происходит выравнивание температур по толщине смазки за счет процессов теплопроводности. Однако, (6.16) еще не учитывает взаимодействие равновесной и неравновесной подсистем. Убыль неравновесной энтропии учитывается отрицательными слагаемыми в эволюционном уравнении (6.14), значит эти же слагаемые

должны учитывать прирост равновесной энтропии. С учетом этого обстоятельства получим окончательное уравнение для равновесной энтропии:

$$\tau_s \frac{\partial s}{\partial t} = t_1 \tilde{s} + \tau_s \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right). \quad (6.17)$$

В этом случае температура смазки T (6.10) в стационарном состоянии $\partial s / \partial t = 0$ определяется не только температурой поверхностей трения T_e , играющей роль термостата (окружающей среды), как в (6.16), но также и стационарным значением неравновесной энтропии \tilde{s}_0 .

Согласно уравнениям, приведенным в данном подразделе, управляющими параметрами, которые могут задаваться произвольным образом, являются температура поверхностей трения T_e , нагрузка на верхнюю трущуюся поверхность n , а также скорость движения трущегося блока V , значение которой определяет уровень деформаций ε_{el} . Стационарные значения температуры смазки T_0 , энтропии s_0 , неравновесной энтропии \tilde{s}_0 , а также избыточного объема f_0 устанавливаются с течением времени в результате эволюции системы в согласии с выбранными управляющими параметрами [53]. В общем случае это усложняет рассмотрение, проведенное в предыдущем подразделе диссертационной работы, где указанные параметры полагаются независимыми и выбираются произвольным образом. Причем учет неравновесной энтропии предполагает большее количество стационарных состояний, чем показано на рис. 6.1. Например, условие стационарности $\partial \tilde{s} / \partial t$ в (6.14) приводит к уравнению для стационарных состояний

$$\left[\mu + \lambda - f^2 (\bar{\mu} + \bar{\lambda}) + \tilde{s} (\tilde{\mu} + \tilde{\lambda}) \right]^2 (t_1 \tilde{s} - t_0^* - 2\tilde{\mu} \varepsilon_{el}^2) - \frac{1}{2} (\tilde{\lambda} + \tilde{\mu}) n^2 = 0, \quad (6.18)$$

где ε_{el} — упругая сдвиговая деформация. Уравнение (6.18) относительно \tilde{s} кубическое, причем имеет ненулевые коэффициенты при всех степенях \tilde{s} , а также содержит свободный член. В общем случае оно имеет три корня, представляющие стационарные значения \tilde{s}_0 . При этом картина стационарных состояний, представленная на рис. 6.1, где полагается $\tilde{s} = 0$, существенно усложняется.

6.1.3. Кинетика трибологической системы

Для исследования кинетики трибологической системы, показанной на рис. 1.21, необходимо совместно численно решать систему кинетических уравнений (2.31), (6.13), (6.14), (6.17), определяя упругую деформацию ε_{el} из (2.16), инварианты — согласно (5.13), (5.14), сдвиговые напряжения τ из (5.15), упругие постоянные из (6.6), (6.7), текущую температуру T смазки согласно (6.10), а силу трения F — из выражения (2.30).

Будем рассчитывать кинетические зависимости исследуемых величин при параметрах рис. 6.1 и $t_0^* = 600$ К, $t_1 = 200$ К²·м³/Дж, $\tilde{\lambda} = 2 \cdot 10^9$ К, $\tilde{\mu} = 5 \cdot 10^9$ К, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_s = 0,01$ К²·с/Па, $\kappa = 10^{-10}$ Вт/(К·м), $K = 2000$ Н/м, $M = 0,1$ кг, $\gamma = 2/3$, $k = 0,6$ Па·с^{5/3}, $A = 5 \cdot 10^{-9}$ м². Результат решения указанных уравнений представлен на рис. 6.2, где приведены зависимости от времени силы трения F (2.30), скорости сдвига верхнего трущегося блока $V = \dot{X}$, координаты блока X , натяжения пружины ΔX (2.32), а также упругих напряжений τ (5.15), возникающих в смазочном слое. Рисунок показывает, что

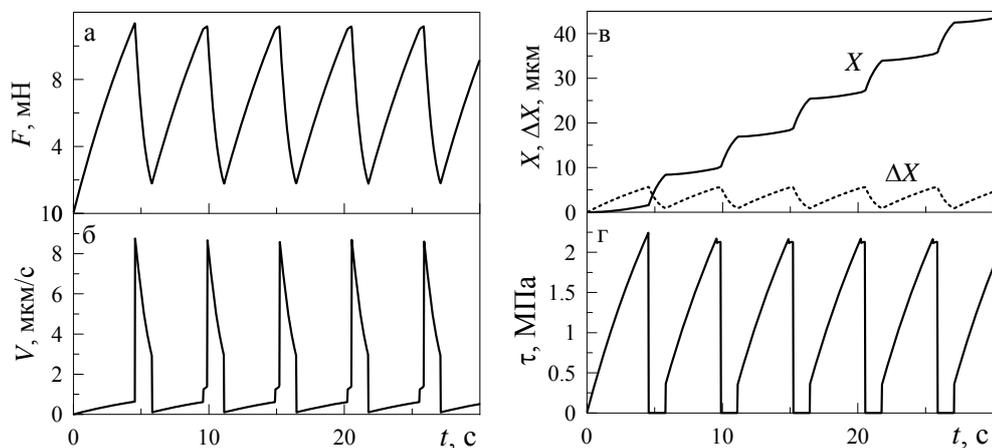


Рис. 6.2. Зависимости полной силы трения F (2.30), скорости сдвига верхней трущейся поверхности V , ее координаты X , длины растяжения движущей пружины ΔX и упругих сдвиговых напряжений τ от времени t при $T_e = 250$ К, $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $V_0 = 1600 \cdot 10^{-9}$ м/с.

в начале движения все представленные параметры монотонно возрастают, потому как для плавления необходимо, чтобы либо температура T , либо скорость сдвига V превышала критическое значение. Поскольку приведенные зависимости получены для значения температуры поверхностей трения T_e , обес-

печивающей температуру T меньше критической величины, в состоянии покоя при $t = 0$ смазка находится в твердоподобном состоянии и характеризуется ненулевым значением эффективного модуля сдвига. В начальный момент времени свободный конец пружины начинает перемещаться со скоростью $V_0 \neq 0$, что приводит к ее натяжению, росту скорости сдвига верхней поверхности V , и согласно (2.30), увеличению силы трения F . В результате

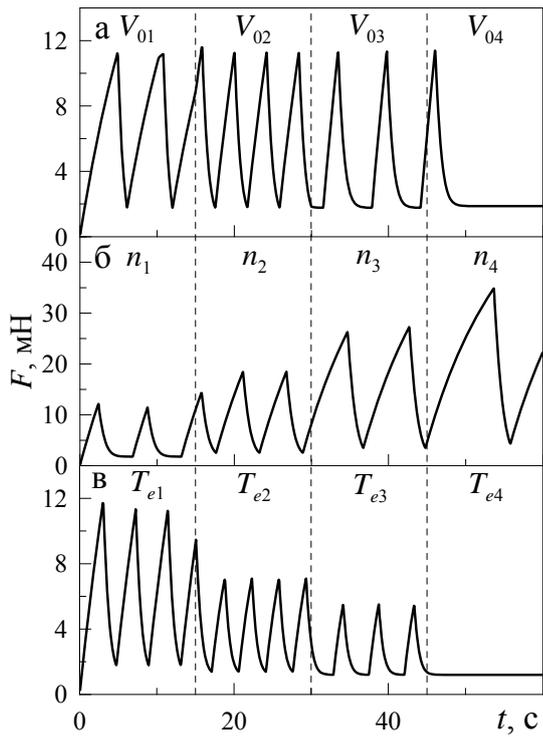


Рис. 6.3. Зависимости силы трения $F(t)$ (2.30) при параметрах рис. 6.2: (а) $T_e = 250$ К, $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $V_{01-04} = 1500, 2300, 2895, 3000$ нм/с; (б) $T_e = 250$ К, $V_0 = 2895$ нм/с, $n_{1-4} = -7 \cdot 10^5, -3 \cdot 10^6, -5 \cdot 10^6, -6,5 \cdot 10^6$ Па; (в) $V_0 = 2300$ нм/с, $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $T_{e1-4} = 250, 400, 454, 455$ К.

этого наступает момент времени, когда скорость V превышает критическое значение и реализуется плавление смазочного материала согласно механизма "плавления сдвигом" [12, 308]. После первого плавления устанавливается прерывистый режим движения [309, 310], подобный показанному ранее на рис. 5.6. Однако, в рассматриваемом случае существует отличие, видное на зависимости $\tau(t)$ на рис. 6.2г, на котором после первого плавления на последующих пиках зависимости напряжений от времени реализуются особенности [262].

На режим трения сильное влияние оказывают управляющие параметры (температура поверхностей T_e , скорость сдвига V_0 и внешнее давление n). На рис. 6.3а показана зависимость силы трения F (2.30) от времени при увеличивающейся скорости сдвига свободного конца пружины V_0 при остальных фиксированных параметрах. Видно, что рост скорости в начале приводит к увеличению частоты фазовых переходов, а затем указанная частота снижается за счет появления на зависимости $F(t)$ кинетических участков $F = \text{const}$. Также отметим, что существует критическое значение скорости V_c , при превышении которого смазка все время находится в жидкоподобном состо-

янии и обеспечивает кинетический режим скольжения с минимальным постоянным значением силы трения ($V_0 = V_{04}$). Такое поведение неоднократно наблюдалось в экспериментах [12, 133]. С ростом нормальной компоненты нагрузки, приложенной к верхней трущейся поверхности (рис. 6.3б), происходит уменьшение длины кинетического участка $F = \text{const}$ и возрастание амплитуды силы трения. Согласно рисунку уровень нагрузки влияет на систему нетривиальным образом, поскольку частота фазовых переходов сначала увеличивается, а затем снова уменьшается. Подобные особенности демонстрировала трибологическая система, детально исследованная в экспериментальной работе [12]. Отметим, что нетривиальное влияние нагрузки на поведение системы в целом связано еще и с тем, что при превышении нормальными внешними напряжениями критического значения изменяется тип фазового перехода [51]. И наконец, с повышением температуры (нижняя панель рассматриваемого рисунка) система показывает тенденции к плавлению, что выражается в уменьшении амплитуды $F(t)$, а также в удлинении кинетических участков $F = \text{const}$. При превышении температурой критической величины ($T_e = T_{e4}$) смазка плавится полностью, что приводит к установлению кинетического режима скольжения с постоянной скоростью V , что, в свою очередь, обеспечивает постоянное значение силы трения $F = \text{const}$.

Отметим, что согласно экспериментальной работе [12], появление длинных кинетических участков $F = \text{const}$ на зависимости $F(t)$ происходит тогда, когда значение скорости сдвига V близко к критической величине, при которой происходит плавление. В рамках нашей модели эта особенность также проявляется, поскольку на рис. 6.3а скорости V_{03} и V_{04} близки по значению. Рис. 6.3в показывает такую же особенность для температуры поверхностей трения, поскольку T_{e3} и T_{e4} , как и скорости на верхней панели рисунка, имеют близкие значения.

6.2. Многомерный термодинамический потенциал

Используя разложение (6.1), нам удалось удовлетворительно описать результаты экспериментов по граничному трению. Однако, в общем случае такой вид разложения энергии неизвестен, и в нем необходимо учитывать гораздо большее

количество слагаемых. В данном подразделе диссертации приведем исследование, основанное на более общем виде разложения, которое учитывает большее количество взаимодействий.

6.2.1. Внутренняя энергия и основные уравнения

Согласно общей процедуре [304], внутренняя энергия для модели, в которой одновременно учтены вклады от больших сдвиговых деформаций ε_{ij}^e и по энтропии s , имеет вид:

$$\begin{aligned}
 u = & u_0^* + \sigma_0 \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha s^2 + \beta s \varepsilon_{ii}^e + \\
 & + t_0 \tilde{s} - \frac{1}{2} t_1 \tilde{s}^2 + \frac{1}{3} t_2 \tilde{s}^3 - \frac{1}{4} t_3 \tilde{s}^4 + \\
 & + \frac{c}{2} (\nabla f)^2 + \phi_0 f - \frac{1}{2} \phi_1 f^2 + \frac{1}{3} \phi_2 f^3 - \frac{1}{4} \phi_3 f^4 - \\
 & - m_1 \tilde{s} f + m_2 \tilde{s}^2 f + m_3 \tilde{s} f^2 - m_4 \tilde{s}^3 f - m_5 \tilde{s}^2 f^2 - m_6 \tilde{s} f^3, \quad (6.19)
 \end{aligned}$$

где в свою очередь

$$\begin{aligned}
 t_0 &= t_0^* + X_3^{(0)} \varepsilon_{ii}^e + X_5^{(0)} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + X_6^{(0)} (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha t s, \\
 t_1 &= t_1^* + X_4^{(0)} \varepsilon_{ii}^e; \quad (6.20)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \phi_0 &= \phi_0^* + g \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha_\phi s, \\
 \phi_1 &= \phi_1^* + 2e \varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2} \tilde{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \tilde{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2, \\
 \phi_2 &= \phi_2^* + q \varepsilon_{ii}^e; \quad (6.21)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 m_1 &= m_1^* + X_3 \varepsilon_{ii}^e + X_5 (\varepsilon_{ii}^e)^2 + X_6 (\varepsilon_{ij}^e)^2, \\
 m_2 &= m_2^* + X_4 \varepsilon_{ii}^e, \\
 m_3 &= m_3^* + Y \varepsilon_{ii}^e. \quad (6.22)
 \end{aligned}$$

Выражение (6.19) записано в самом общем виде с сохранением всех слагаемых вплоть до 4-го порядка. Запись имеет простой и симметричный вид. В первой строке учтены все равновесные переменные, которые и только они учтены в квадратичном приближении. Во второй строке слагаемые, зависящие от неравновесной энтропии и от равновесных параметров. В третьей строке слагаемые, завися-

щие от параметра порядка и равновесных параметров. В последней строке приведены смешанные слагаемые по обоим типам неравновесных переменных и от равновесных параметров. Нечетные степени неравновесных переменных положительные, четные — отрицательные, все знаки в расшифровках коэффициентов положительные.

Запишем соответствующие эволюционные уравнения для неравновесных параметров X_i в виде

$$\tau_{X_i} \dot{X}_i = \frac{\partial u}{\partial X_i}, \quad (6.23)$$

где τ_{X_i} — время релаксации. Отметим, что в подразделе 6.1 диссертации рассматривалась ситуация, в которой по параметру f внутренняя энергия стремится к минимуму, а по параметру \tilde{s} — к максимуму, согласно выражениям (6.12). В предлагаемом обобщении будем считать, что по всем неравновесным параметрам система стремится к максимуму внутренней энергии u . Это связано с особенностями дальнейшего описания эволюции системы, где результатом прерывистого режима трения являются не переходы между стационарными состояниями, а конкурирующие взаимодействия между термодинамическими подсистемами, характеризующиеся различными временами релаксации. Более того, в рассматриваемом случае можно описать и ситуацию, задающуюся уравнениями (6.12), при соответствующей модификации разложения (6.19). В таком случае мы получим качественно аналогичную картину. При использовании (6.23) уравнение для параметра порядка принимает вид

$$\begin{aligned} \tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = & \phi_0 - \phi_1 f + \phi_2 f^2 - \phi_3 f^3 - m_1 \tilde{s} + \\ & + m_2 \tilde{s}^2 + 2m_3 \tilde{s} f - m_4 \tilde{s}^3 - 2m_5 \tilde{s}^2 f - 3m_6 \tilde{s} f^2, \end{aligned} \quad (6.24)$$

а для неравновесной энтропии \tilde{s} получим

$$\begin{aligned} \tau_s \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} = & t_0 - t_1 \tilde{s} + t_2 \tilde{s}^2 - t_3 \tilde{s}^3 - m_1 f + 2m_2 \tilde{s} f + \\ & + m_3 f^2 - 3m_4 \tilde{s}^2 f - 2m_5 \tilde{s} f^2 - m_6 f^3. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Температура определится выражением

$$T = \frac{\partial u}{\partial s} = 2\alpha s + \alpha_t \tilde{s} + \alpha_\phi f + \beta \varepsilon_{ii}^e. \quad (6.26)$$

Эволюционное уравнение для равновесной энтропии согласно процедуре, описанной в подразделе 6.1.2 диссертации, приобретает вид

$$\tau_s \frac{\partial s}{\partial t} = t_1 \tilde{s} + t_3 \tilde{s}^3 + m_1 f + 3m_4 \tilde{s}^2 f + 2m_5 \tilde{s} f^2 + m_6 f^3 + \tau_s \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right), \quad (6.27)$$

где температура T задается выражением (6.26). Согласно (6.19), упругие напряжения определяются как $\sigma_{ij}^e = \partial u / \partial \varepsilon_{ij}^e$:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^e &= \sigma_0 \delta_{ij} + \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e + \beta s \delta_{ij} + \\ &+ \left(X_3^{(0)} \delta_{ij} + 2X_5^{(0)} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2X_6^{(0)} \varepsilon_{ij}^e \right) \tilde{s} - \frac{1}{2} X_4^{(0)} \tilde{s}^2 \delta_{ij} + \\ &+ \left(g \delta_{ij} + \bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e \right) f - \\ &- \left(e \delta_{ij} + \frac{1}{2} \tilde{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + \tilde{\mu} \varepsilon_{ij}^e \right) f^2 + \frac{1}{3} q f^3 \delta_{ij} - \\ &- \left(X_3 \delta_{ij} + 2X_5 \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2X_6 \varepsilon_{ij}^e \right) \tilde{s} f + X_4 \tilde{s}^2 f \delta_{ij} + Y \tilde{s} f^2 \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (6.28)$$

Выражение (6.28) можно представить в виде эффективного закона Гука

$$\sigma_{ij}^e = \sigma_v \delta_{ij} + 2\mu_{eff} \varepsilon_{ij}^e + \lambda_{eff} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} \quad (6.29)$$

с эффективными упругими параметрами

$$\mu_{eff} = \mu + X_6^{(0)} \tilde{s} + \bar{\mu} f - \frac{1}{2} \tilde{\mu} f^2 - X_6 \tilde{s} f, \quad (6.30)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda + 2X_5^{(0)} \tilde{s} + \bar{\lambda} f - \frac{1}{2} \tilde{\lambda} f^2 - 2X_5 \tilde{s} f. \quad (6.31)$$

В (6.29) также появляется слагаемое, не зависящее от деформации

$$\sigma_v = \sigma_0 + \beta s + X_3^{(0)} \tilde{s} - \frac{1}{2} X_4^{(0)} \tilde{s}^2 + g f - e f^2 + \frac{1}{3} q f^3 - X_3 \tilde{s} f + X_4 \tilde{s}^2 f + Y \tilde{s} f^2. \quad (6.32)$$

Первый инвариант в рассматриваемом случае определится как

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n - \sigma_v}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}, \quad (6.33)$$

где из напряжений вычтен вклад σ_v , не связанный с деформациями. Второй инвариант, как и ранее, определяется согласно соотношению (5.14).

Будем считать, что время релаксации упругой деформации зависит от состояния смазочного материала:

$$\tau_\varepsilon = K'(\gamma_0 - \gamma_1 f), \quad (6.34)$$

где введены постоянные γ_0 , γ_1 и коэффициент K' . Уравнение (6.34) учитывает уменьшение времени релаксации τ_ε с ростом параметра порядка f . Для твердоподобного состояния смазки $K' = K_{sol}$. В твердоподобном состоянии τ_ε велико, и поэтому деформация ε_{el} также велика. Для жидкоподобного состояния τ_ε уменьшается, и ε_{el} также убывает. С учетом (6.34) кинетическое уравнение для упругих деформаций (2.15) запишется в виде

$$\dot{\varepsilon}_{el} + \frac{\varepsilon_{el}}{K'(\gamma_0 - \gamma_1 f)} = \frac{V}{h}. \quad (6.35)$$

Экспериментальные данные однозначно утверждают, что в жидкоподобном состоянии упругие деформации релаксируют очень быстро [12], т.е. время релаксации для жидкоподобного состояния будет существенно меньшим. Формула (6.34) при $K' = K_{sol}$ уже несет в себе тенденцию уменьшения времени релаксации с плавлением (при увеличении f), но такая зависимость справедлива только для твердоподобного состояния и вблизи точки перехода [121]. Поэтому для жидкоподобной смазки следует полагать $K' = K_{liq} < K_{sol}$. Для учета гистерезисных явлений при плавлении выделим два характерных значения параметра порядка: при $f > f_{liq}$ смазка плавится, а когда $f < f_{sol}$, она затвердевает.

6.2.2. Влияние скорости и сдвиговое плавление

Рассмотрим схему сдвигового плавления, подробно показанную на рис. 1.3. Если мы будем сдвигать верхнюю трущуюся поверхность вправо, то сначала смазка находится в твердоподобном состоянии (*stick*), а затем, при превышении критического значения упругих сдвиговых напряжений τ , она резко плавится с переходом в жидкоподобную фазу (*slip*) за счет разупорядочения атомов. Причем при плавлении верхняя поверхность, как это видно на рисунке, приподнимается, поскольку происходит изменение объема смазочного слоя. В жидкоподобном состоянии сразу происходит релаксация напряжений τ , и смазка за счет сдавливания стенок под действием внешней нагрузки снова затвердевает (*stick*). Данный

процесс является периодическим и приводит к прерывистому характеру движения [12]. Одно из основных отличий от поведения объемных смазок в этом механизме состоит в том, что действие сдвиговых напряжений τ приводит не только к сдвигу, но и к увеличению объема смазки. Этот факт согласуется с результатами, полученными с помощью методов молекулярной динамики [13], и может быть отражен с помощью модифицирования соотношения (5.13) следующим образом:

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n - \sigma_v + \sigma_{ij}^e \varepsilon_{ij}^a}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}. \quad (6.36)$$

Здесь введена безразмерная тензорная постоянная ε_{ij}^a , которая задает степень дилатансии (расширение смазки при сдвиге под действием сдвиговых напряжений τ). При этом следует также учитывать, что действие сдвиговых напряжений приводит к росту толщины смазки h . Относительное увеличение объема¹⁹ за счет роста толщины смазки можно выразить таким образом:

$$\frac{\delta Q}{Q_0} = \frac{A \delta h}{A h} = \frac{\delta h}{h}, \quad (6.37)$$

где A — площадь контакта. Приравняв вклад в относительное увеличение объема из (6.36) за счет сдвиговых напряжений и последнее выражение, получим изменение толщины смазочного слоя в виде

$$\delta h = h \frac{\sigma_{ij}^e \varepsilon_{ij}^a}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}. \quad (6.38)$$

В последующих расчетах толщину h в (6.35) следует заменить выражением $h + \delta h$. Теперь модель является полной, так как наряду с термодинамическим плавлением учитывает и плавление сдвигом.

Далее для моделирования выбираются значения параметров [46] $\sigma_0 = 0,1$ Па, $\lambda = 200$ Па, $\mu = 10^8$ Па, $\alpha = 4,1$ Дж⁻¹·м³·К², $\beta = 2,2$ К, $X_3^0 = 2,02$ К, $X_6^0 = 4 \cdot 10^6$ К, $t_1^* = 150$ К²·м³/Дж, $X_4^0 = 50$ Дж⁻¹·м³·К², $g = 0,1$ Па, $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^5$ Па, $\phi_1^* = 500$ Дж/м³, $e = 10,8$ Па, $\tilde{\mu} = 24$ Па, $m_1^* = 3$ К, $X_3 = 1,12$ К, $X_6 = 4040$ К, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_s = 0,1$ К²·с/Па, $\kappa = 10^{-11}$ Вт·м⁻¹·К⁻¹, $\alpha_t = 0,2$ Дж⁻¹·м³·К², $\alpha_\phi = 0,2$ К, $h = 10^{-9}$ м, $T_e = 300$ К, $\varepsilon_{ij}^a = 1$, $n = -10^5$ Па, $\gamma_0 = 0,0025$ с,

¹⁹Физический смысл первого инварианта (6.36) — это относительное изменение объема $\delta Q/Q_0$, где δQ — изменение объема, а Q_0 — начальный объем до деформирования.

$\gamma_1 = 0,005$ с, $K_{sol} = 1$, $K_{liq} = 0,07$, $f_{sol} = 0,04$, $f_{liq} = 0,05$. Не указанные здесь параметры теории полагаются равными нулю.

Результат совместного численного решения уравнений, приведенных в подразделе 6.2.1 диссертационной работы, показан на рисунке 6.4. Из рисунка

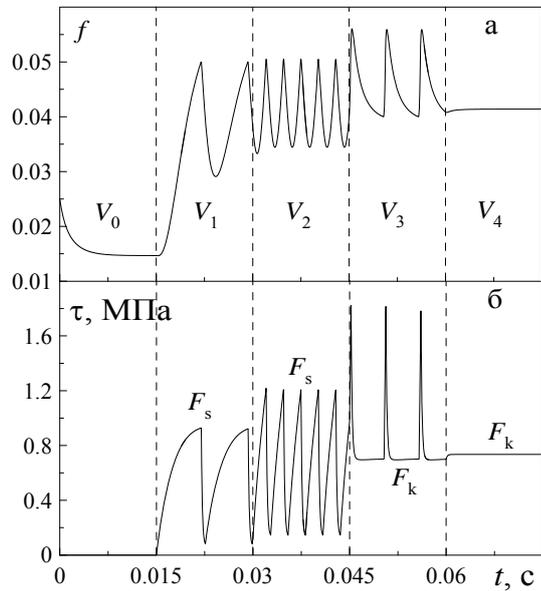


Рис. 6.4. Временные зависимости избыточного объема f и сдвиговых напряжений τ (5.15). Значения скоростей сдвига V : $V_0 = 0$ нм/с, $V_1 = 2$ нм/с, $V_2 = 4$ нм/с, $V_3 = 21$ нм/с, $V_4 = 22$ нм/с.

следует, что при нулевой скорости относительного движения трущихся поверхностей сдвиговые напряжения τ (5.15) равны нулю, избыточный объем f уменьшается, а смазочный слой при этом постепенно затвердевает за счет сдавливания стенок. Когда система начинает движение ($V = V_1$), смазка начинает плавиться под действием растущих напряжений τ , и параметр порядка при этом возрастает. Когда f достигает значения $f = f_{liq}$, смазка плавится полностью, и поскольку время релаксации в (6.35) становится малым, напряжения τ начинают уменьшаться. Смазка при этом опять начинает затвердевать, так как в расплавленном состоянии ее поддерживают упругие напряжения. Когда она затвердеет полностью ($f = f_{sol}$), за счет увеличения времени релаксации в (6.35) параметр порядка f опять увеличивается, пока не достигнет значения f_{liq} , и процесс повторится снова. Согласно сказанному, устанавливается периодический прерывистый (*stick-slip*) режим плавления/затвердевания. Следует отметить, что при $V = V_1$ параметр порядка при превышении значения f_{liq} сразу начинает уменьшаться, а при затвердевании и достижении $f = f_{sol}$ еще некоторое время уменьшается, а только затем увеличивается. Это связано с тем, что для увеличения f необходимо минимальное значение напряжений, а так как скорость мала, это значение, согласно (6.35), развивается медленно. Поэтому после затвердевания избыточный объем может продолжать уменьшаться, пока не будет достигнуто соответствующее значение

следует, что при нулевой скорости относительного движения трущихся поверхностей сдвиговые напряжения τ (5.15) равны нулю, избыточный объем f уменьшается, а смазочный слой при этом постепенно затвердевает за счет сдавливания стенок. Когда система начинает движение ($V = V_1$), смазка начинает плавиться под действием растущих напряжений τ , и параметр порядка при этом возрастает. Когда f достигает значения $f = f_{liq}$, смазка плавится полностью, и поскольку время релаксации в (6.35) становится малым, напряжения τ начинают уменьшаться. Смазка при этом опять начинает затвердевать, так как в расплавленном состоянии ее поддерживают упругие

напряжений. При повышении скорости до значения $V = V_2$ частота *stick-slip* переходов увеличивается за счет того, что при этой скорости в системе быстрее развиваются напряжения. Соответственно, смазка плавится быстрее, и за один и тот же промежуток времени система успевает совершить большее количество переходов плавление/затвердевание. С еще бóльшим увеличением скорости $V = V_3$ частота пиков снова уменьшается, поскольку при больших скоростях в уравнении (6.35) напряжения релаксируют к бóльшему стационарному значению, при котором смазка медленней затвердевает. При этом на зависимости $\tau(t)$ видны длинные кинетические участки $\tau = \text{const}$. В этом режиме при превышении $f > f_{liq}$ параметр порядка еще некоторое время увеличивается, а затем начинает убывать. При дальнейшем росте скорости сдвига $V = V_4$ прерывистый режим исчезает, и устанавливается кинетический режим жидкоподобной смазки со значением силы трения F_k . Это происходит потому, что при скорости V больше критической $V > V_c$ в смазке возникают напряжения τ , достаточные для обеспечения значения $f > f_{sol}$, при котором она не может затвердеть. Отметим, что при повышении скорости на зависимости $\tau(t)$ увеличиваются значения напряжений, соответствующих кинетическому режиму с силой трения F_k . Этот факт согласуется с предложенной ранее механистической моделью [131]. Таким образом, при увеличении скорости сначала частота *stick-slip* переходов увеличивается, затем уменьшается за счет появления длинных кинетических участков на зависимости силы трения от времени $F = \text{const}$, а при превышении критического значения скорости сдвига $V > V_c$ прерывистый режим исчезает. Описанное поведение хорошо согласуется с экспериментальными результатами, показанными на рис. 1.4 литературного обзора.

6.2.3. Влияние температуры и нагружения

Смазка может плавиться не только за счет сдвигового плавления при повышении скорости, но также и обычным образом при повышении температуры. Для

исследования влияния температуры получим временные зависимости для избыточного объема и напряжений, подобные показанным на рис. 6.4. Значение скорости сдвига V при этом примем постоянным, а увеличивать будем температуру сдвигаемых поверхностей T_e . Указанные зависимости приведены на рис. 6.5. Из

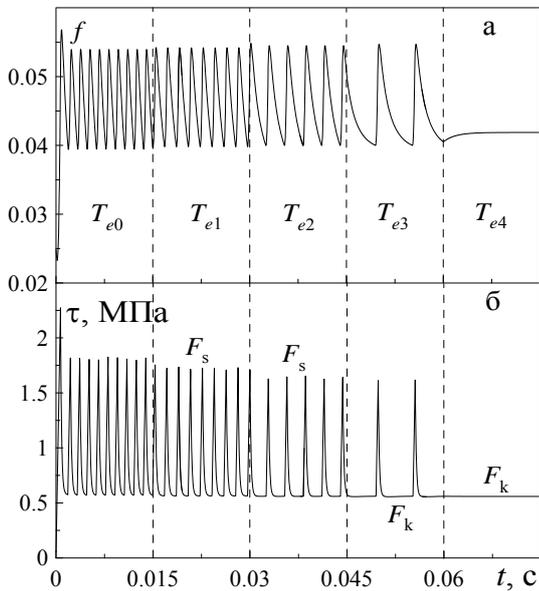


Рис. 6.5. Зависимости $f(t)$ и $\tau(t)$ при параметрах рис. 6.4 и скорости сдвига $V = 27$ нм/с. Значения температур $T_{e0-4} = 50, 230, 400, 490, 550$ К.

рисунка видно, что при малой температуре поверхностей трения $T_e = T_{e0}$ частота *stick-slip* переходов велика, и кинетический участок на зависимости $\tau(t)$ не прослеживается. Это говорит о том, что смазка после плавления сразу начинает затвердевать. С увеличением температуры до значения $T_e = T_{e1}$ частота пиков становится меньше, как и их высота. Уменьшение высоты пиков говорит о снижении статической силы трения F_s . С еще бóльшим увеличением $T_e = T_{e2}$ становится выраженным кинетический участок $\tau = \text{const}$, т.е. смазка существует какое-то время в расплавленном состоянии при постоянных напряжениях. Однако, за

счет процессов диссипации избыточный объем уменьшается, смазочный слой затвердевает, и реализуется прерывистый режим. При $T_e = T_{e3}$ кинетический участок становится определяющим, поскольку здесь смазка бóльшую часть времени находится в жидкоподобном состоянии. И, наконец, при $T_e = T_{e4}$ смазка окончательно плавится, и наступает кинетический режим трения.

Эксперименты по исследованию граничного трения проводятся при различных величинах нагрузки на трущиеся поверхности. Установлено, что внешнее давление влияет на поведение системы критическим образом [12]. На рис. 6.6 показаны временные зависимости напряжений $\tau(t)$ при постоянных значениях температуры системы и сдвиговой скорости, но при повышении внешней нагрузки n . На рис. 6.6а значение температуры выбрано таким, что $T_e < T_c$, и реализуется прерывистый режим. Видно, что с ростом нагрузки сила трения увеличивается,

поскольку растет амплитуда *stick-slip* переходов. Если повысить температуру до значения $T_e > T_c$ (рис. 6.6б), то прерывистый режим исчезает, и устанавливается кинетический режим, где с ростом давления сила трения также возрастает. Описанные особенности качественно совпадают с экспериментальными зависимостями, полученными в работе [12].

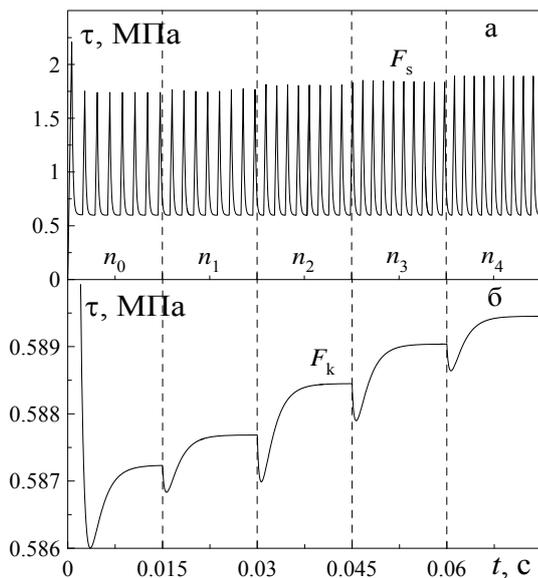


Рис. 6.6. Зависимости $\tau(t)$ при параметрах рис. 6.4, $V = 18$ нм/с и значениях внешнего нормального давления $n_{0-4} = -0,05; -0,1; -0,2; -0,3; -0,4$ МПа: (а) $T_e = 200$ К; (б) $T_e = 600$ К.

Особенностью предложенного в подразделе 6.2 диссертации подхода к описанию граничного режима трения состоит в том, что здесь рассматривается не трибологическая система, показанная на рис. 1.21, как это было во всех предыдущих разделах работы, а исследуется случай сдвига трущихся поверхностей с постоянной скоростью V , без наличия между трущимся блоком и движущим устройством пружины. В этом случае невозможно установление прерывистого режима движения, прежде всего поскольку движение осуществляется с постоянной скоростью V . Однако, даже в этом случае наблюдается прерывистый вид зависимостей упругих напряжений от времени, кото-

рые показаны на рис. 6.4, рис. 6.5 и рис. 6.6. Причина такого поведения кроется в том, что для твердоподобного и жидкоподобного состояний (характеризуются различными значениями параметра порядка f) здесь выбираются различные времена релаксации сдвиговых деформаций τ_ϵ в уравнении (6.35) (см. также (6.34)). Такая процедура приводит к пилообразному виду зависимостей $\tau(t)$. Экспериментально воссоздать движение сдвигаемых поверхностей с постоянной скоростью на основе SFA сложно, поскольку в нем движущиеся поверхности изначально закреплены с помощью пружин. Поэтому полученные в этом подразделе результаты являются скорее прогнозирующими. Однако, если потенциал (6.19) использовать для моделирования системы, показанной на рис. 1.21, возможно

подобрать условия, при которых будет реализоваться обычный прерывистый режим движения трущихся поверхностей.

6.3. Модель скольжения по границам зерен в процессе пластической деформации

Сверхпластичность (СП) является одним из интригующих свойств большого класса твердых тел, привлекающее уже длительное время внимание исследователей [311,312]. Для объяснения механизмов этого явления применялись различные теоретические модели [313–315]. Многие из них базируются на представлениях о проскальзывании по границам зерен (ГЗ) [311–313]. Одно из направлений развития теории СП базируется на представлениях о плавлении ГЗ [314, 316]. В этом ракурсе ГЗ можно рассматривать как сверхтонкую смазку, разделяющую соседние зерна. При этом мы пока отвлекаемся от таких усложняющих факторов, как конечные размеры зерен и влияние тройных стыков. В тонких смазках наблюдаются разные режимы скольжения, в том числе и режим прерывистого движения *stick-slip*. Если представить, что в зоне ГЗ возможно плавление сдвигом, то в результате теплового обмена с объемами зерен возможно также и затвердевание "смазки". Периодическое повторение этого процесса приведет к прерывистому режиму движения. Возможность пребывания границ зерен в расплавленном состоянии пока не является доказанной, поскольку в настоящее время отсутствуют измерения или оценки энтропии границ зерен (см. подробное обсуждение проблемы в книге Глейтера [316]). Существующие доказательства отсутствия плавления ГЗ базируются на представлениях равновесной термодинамики. Однако следует иметь в виду, что проблематичным может быть существование равновесного термодинамического плавления в отсутствие внешних воздействий, в то время как плавление в области ГЗ может наступить и поддерживаться при наличии интенсивных внешних воздействий, например, ИПД, или сверхпластического течения. В этом случае система в целом находится в сильно неравновесном состоянии, и плавление ГЗ может осуществиться по механизму сдвигового плавления. Это означает, что изначально границы могут быть и не в расплавлен-

ном состоянии, но перейдут в это состояние (сдвиговое плавление) в процессе деформирования. Другим аргументом в пользу этих представлений можно привести также хорошо известные, наблюдаемые экспериментально на бикристаллах эффекты [312, 316]. Бикристаллы можно рассматривать, как идеальную плоскую бесконечную границу зерна. В них при скольжении, как и в смазках, также наблюдаются периодические прерывистые режимы скольжения — ”продолжительные циклы, в которых скорость скольжения убывает практически до нуля, перед тем как увеличиться снова“ [316].

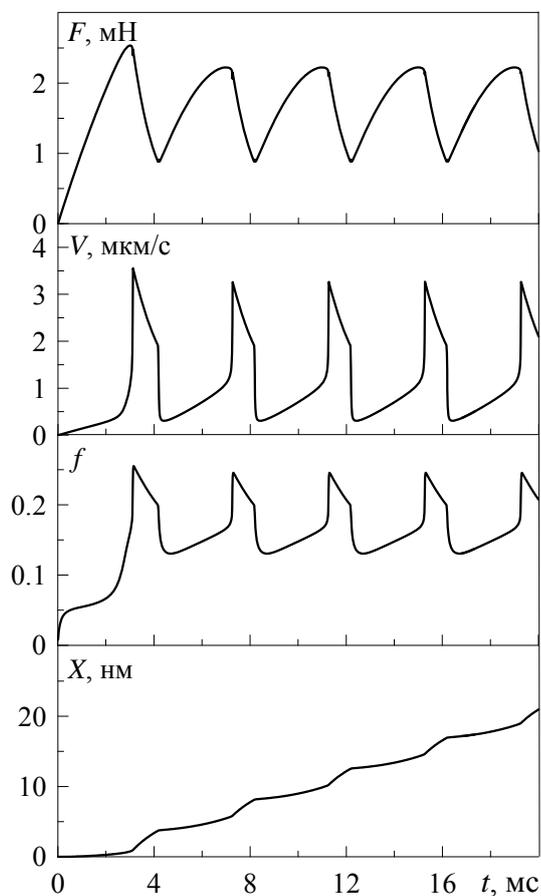


Рис. 6.7. Зависимости силы трения F (2.30), скорости сдвига верхнего зерна V и его координаты X от времени t при параметрах $M = 10^{-3}$ кг, $K = 10^6$ Н/м, $k = 0,6$ Па·с $^{5/3}$, $\gamma = 2/3$, $A = 5 \cdot 10^{-9}$ м 2 , $T = 300$ К, $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $V_0 = 1,1$ мкм/с.

Для описания процессов плавления ГЗ воспользуемся подходом, описанным в подразделе 5.1 диссертационной работы. Результаты моделирования приведены на рис. 6.7. Сначала относительное движение трущихся зерен со скоростью V приводит к увеличению избыточного объема f . Когда f достигает критического значения, ГЗ плавится, а параметр f скачкообразно растёт. После этого ГЗ опять начинает затвердевать, поскольку уменьшается относительная скорость движения поверхностей трения $V = \dot{X}$ (рис. 1.21). Когда ГЗ затвердеет полностью, в ней появляются упругие напряжения τ , последующее увеличение которых опять приводит к росту параметра f , и процесс повторяется снова. В результате устанавливается периодический прерывистый *stick-slip* режим плавления/затвердевания ГЗ. Отметим, что с ростом скорости V_0 частота *stick-slip* пиков сначала увеличивается за счет более быстрого установления критического значения f .

Соответственно ГЗ быстрее плавится, и за фиксированный промежуток време-

ни происходит большее количество переходов плавления/затвердевания. С еще бóльшим увеличением скорости V_0 частота пиков на рассматриваемых зависимостях снова уменьшается за счет появления на зависимости $F(t)$ длительных кинетических участков. Указанный подход описывает механизм плавления ГЗ, и не претендует на построение полноценной теории пластичности, для чего необходимо решить ряд важных вопросов, рассмотрение которых выходит за пределы настоящего диссертационного исследования, которое посвящено описанию процессов граничного трения.

6.4. Выводы к разделу 6

1. Предложена неравновесная термодинамическая модель, описывающая процессы граничного трения. Записана полная система кинетических уравнений, в которой управляющими параметрами являются относительная скорость сдвига трущихся поверхностей, их температура, а также внешнее нормальное давление. При построении модели учтены процессы теплопроводности, что позволяет описывать затвердевание смазки за счет отдачи тепла поверхностям трения (окружающей среде). Выделено две подсистемы – неравновесная, получающая теплоту при совершении над системой работы (сдвиге поверхностей), и равновесная, в которую частично переходит эта теплота в результате внутренних процессов. Таким образом, рассматривается открытая система с типом неравновесности, связанным с двусторонним обменом системы энергией с окружающими телами.

2. Установлено, что за счет тонкости смазочного материала происходит быстрая релаксация температуры смазочного материала, которая при малых скоростях сдвига релаксирует к значению температуры поверхностей трения. Однако, для более толстых смазок и высоких скоростей сдвига разница между температурами может быть существенной, что приведет к изменению значений температур, скоростей, и внешних нормальных напряжений, при которых происходят переходы плавление/затвердевание.

3. Разработанное в диссертации термодинамическое представление процессов граничного трения применимо к описанию процессов, происходящих в твердом

теле при его интенсивном нагружении в режиме сверхпластичности. Для объяснения причин возникновения сверхпластичности рассматривается известная модель скольжения по границам зерен. При таком подходе граница зерна представляет граничную смазку, разделяющую соседние зерна. Рассмотрена кинетика процесса на основе системы, состоящей из двух трущихся кристаллических тел.

Результаты, представленные в данном разделе, опубликованы в статьях [42, 44, 46, 51, 54], статьях в материалах конференций [60, 62] и тезисах докладов на конференциях [71, 81].

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Проведенные в диссертационной работе исследования позволили решить практически важную научную проблему ”Термодинамика фазовых переходов между кинетическими состояниями граничной смазки“. Полученные результаты позволяют существенно продвинуться в понимании механизмов граничного трения в нанотрибологических системах. Предложена термодинамическая модель, в рамках которой описан ряд эффектов, наблюдаемых экспериментально в режиме граничного трения при наличии между контактирующими поверхностями граничной смазки. В различных ситуациях проведено изучение влияния управляющих параметров типа относительной скорости сдвига трущихся поверхностей, температуры, а также уровня нагружения, на процессы трения. В целом предложенное исследование существенно расширяет современные представления о процессах, проходящих в наноразмерных системах, имеющих контактирующие поверхности, при их сдвиге, когда обычные законы трения, типа закона Амонтона, становятся неприменимыми. Проведено обобщение рассматриваемых процессов на неравновесные открытые системы. По результатам работы можно сделать следующие общие выводы.

1. Разработана феноменологическая теория, позволяющая описать поведение ультратонкой пленки смазочного материала между атомарно-гладкими твердыми поверхностями. Плавление и затвердевание смазочного слоя представлено как фазовые переходы первого либо второго рода. Показано, что смазка плавится при превышении температурой либо скоростью сдвига критических значений, для которых найдены аналитические выражения. Построена фазовая диаграмма, на которой реализуются области жидкостного либо сухого трения. Описана кинетика процесса плавления смазки в рамках механических аналогов двух типов трибологических систем. Показано, что возможна реализация трех случаев: либо смазка в процессе трения всегда твердоподобна, либо находится в жидкоподобном состоянии, либо реализуются прерывистый режим трения.

2. В рамках разработанной концепции фазовых переходов проведено моделирование поведения трибологической системы, состоящей из двух контактирую-

щих блоков, один из которых закреплен между двумя пружинами, а другой приведен в непрерывное периодическое движение. Показано, что для псевдопластических жидкостей с ростом температуры смазки упругие напряжения и сила трения в системе уменьшаются. Для сравнения приведены результаты расчетов для дилатантных и ньютоновских жидкостей. Обнаружен режим, в котором поведение системы зависит от направления смещения верхнего трущегося блока, что соответствует реализации в системе эффектов памяти.

3. При учете универсальной зависимости вязкости смазки от температуры и градиента скорости показано, что такой подход позволяет описать ряд эффектов, наблюдаемых экспериментально. В частности, описаны особенности широко распространенных ”стоп-старт“ экспериментов, когда система останавливается на определенное время, а затем вновь продолжает движение. Показано, что при низких температурах смазки и скоростях сдвига реализуется квазистатическая сила трения. Построена зависимость силы трения от времени при длительной остановке внешнего привода, которая демонстрирует, что времена релаксации силы трения к нулевому значению превышают реальные времена экспериментального наблюдения.

4. Показано, что в случае, когда смазочный материал зажат между двумя твердыми поверхностями, обладающими наноразмерными неровностями, возможен режим, в котором в процессе трения смазка по площади контакта представляет доменную структуру, где присутствуют жидкоподобные и твердоподобные участки, вносящие различный вклад в общую силу трения. Для шероховатых поверхностей зависимость силы трения от времени не является строго периодической, но близка к таковой, что подтверждается известными экспериментальными данными.

5. Проведен учет пространственно неоднородного распределения параметра порядка, для чего в разложение свободной энергии введено градиентное слагаемое. Показано, что при этом смазочный материал быстро релаксирует к однородному состоянию, в котором параметр порядка принимает по площади контакта одинаковые значения. Зависимость силы трения от времени близка к периодиче-

ской, что наблюдается экспериментально.

6. В результате динамического моделирования процессов граничного трения между цилиндрическим индентором и плоской поверхностью с учетом их упругих свойств выяснено, что движение с постоянной скоростью приводит к прерывистому режиму плавления смазочного слоя. Показано, что плавление смазки начинается на внешней границе контакта и распространяется внутрь к его центру. Волна плавления сопровождается волной затвердевания. В зависимости от термодинамических и кинетических параметров модели возможны принципиально различные режимы скольжения, в том числе почти полное или частичное затвердевание смазочного материала при движении трущихся поверхностей. С ростом температуры смазки частота скачкообразных переходов увеличивается, а амплитуда силы трения уменьшается.

7. Предложена модель, в которой параметром порядка является избыточный объем. Показано, что рост внешней нагрузки приводит к затвердеванию смазки. В случае симметричного разложения свободной энергии твердоподобное состояние смазки отвечает нулевому значению избыточного объема. Такая ситуация реализуется для систем, в которых смазочный слой состоит из квазисферических молекул, способных образовывать упорядоченные структуры. В случае несимметричного потенциала ненулевое значение параметра избыточного объема отвечает как жидкоподобной, так и твердоподобной смазке. Такое описание справедливо для полимерных цепных молекул, которые не способны полностью упорядочиваться при низких температурах либо больших нагрузках. Модель показывает появление длинных кинетических участков на зависимости силы трения от времени с ростом скорости сдвига, что наблюдается во многих экспериментах.

8. Разработана неравновесная термодинамическая модель граничного трения. При построении модели учтены процессы теплопроводности, что позволяет представить затвердевание смазки за счет отдачи тепла поверхностям трения. Выделено две подсистемы — неравновесную, получающую теплоту при совершении над системой работы, и равновесную, в которую частично переходит эта теплота в результате внутренних процессов. Построены фазовые диаграммы с областями

различных режимов трения. Изучение влияния нормальной компоненты давления на поверхности трения показывает, что фазовый переход первого рода осуществляется при низких нагрузках на трущиеся поверхности, а когда нагрузка превышает критическое значение, он становится непрерывным фазовым переходом второго рода.

9. Показано, что термодинамическая модель граничного трения также может использоваться для описания процессов, происходящих в твердом теле при его интенсивном нагружении в режиме сверхпластичности. Для объяснения причин возникновения сверхпластичности рассматривается модель скольжения по границам зерен, где граница зерна представляет смазку, которой разделены соседние зерна. Показано, что в широком диапазоне параметров реализуется прерывистый режим движения.

10. В результате сравнения подходов, основывающихся на использовании параметров порядка, представляющих избыточный объем и модуляцию плотности, показано, что в некоторых ситуациях оба подхода могут с точностью переходить один в другой, указаны соответствующие случаи. Однако, в общем случае эти два подхода описывают физически различные системы, поскольку по-разному интерпретируют переходы между стационарными значениями модуля сдвига в точке фазового перехода.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает благодарность научному консультанту, доктору физико-математических наук, профессору Хоменко А. В. за поддержку в процессе работы над диссертацией.

Хочу высказать глубокую признательность доктору физико-математических наук, профессору Денисову С. И. за подробный анализ работы и ряд критических замечаний, благодаря которым автор взглянул под иным углом на диссертацию и в результате значительно улучшил ее содержание, а также установил связь между двумя теоретическими подходами, разработанными в диссертации (подраздел 5.3 работы), что позволило сделать работу действительно целостной и лаконичной. Благодарен также доктору физико-математических наук, доценту Шуде И. А. за внимательное прочтение диссертации и полезные замечания, позволившие улучшить ее изложение.

Благодарю также своих учеников, кандидатов физико-математических наук Манько Н. Н. и Заскоку А. Н. за помощь во время работы над диссертацией. Автор благодарен всем сотрудникам кафедры моделирования сложных систем, в первую очередь заведующему кафедрой, доктору физико-математических наук, доценту Лысенко А.В. (студентом которого являлся автор), за постоянную поддержку. Также автор благодарен своим учителям (в школьные годы), а теперь и коллегам по университету, кандидатам физико-математических наук, доцентам Назаренко А. М. и Игнатенко В. М., во многом благодаря которым у автора и появился интерес к науке.

Отдельную благодарность хотел бы выразить доктору Бо Перссону (Bo Persson), доктору физико-математических наук, профессору Попову В. Л., доктору физико-математических наук, старшему научному сотруднику Филиппову А. Э. и доктору физико-математических наук, старшему научному сотруднику Метлову Л. С. за консультационную поддержку при подготовке диссертации, а также за многочисленные плодотворные дискуссии, благодаря которым у автора сформировался теперешний взгляд на проблему, рассматриваемую в диссертационной работе.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Stribeck R. Die Wesentlichen eigenschaften der gleit- und rollenlager (The basic properties of sliding and rolling bearings) / R. Stribeck // Zeitschrift des Vereins Deutscher Ingenieure. – 1902. – Vol. 46, № 38. – P. 1341–1348.
2. Hardy W. Bakerian lecture. Boundary lubrication. Plane surfaces and the limitations of Amontons' law / W. Hardy, I. Bircumshaw // Proceedings of the Royal Society of London A. – 1925. – Vol. 108, № 745. – P. 1–27.
3. Попов В. Л. Механика контактного взаимодействия и физика трения: от нанотрибологии до динамики землетрясений / В. Л. Попов. – Москва : Физматлит, 2013. – 352 с.
4. Titanium nanostructures for biomedical applications / [M. Kulkarni, A. Mazare, E. Gongadze et al.] // Nanotechnology. – 2015. – Vol. 26, № 6. – P. 062002 (18 pp.).
5. Premnath P. Engineering functionalized multi-phased silicon/silicon oxide nano-biomaterials to passivate the aggressive proliferation of cancer / P. Premnath, B. Tan, K. Venkatakrishnan // Scientific Reports. – 2015. – Vol. 5. – P. 12141 (12 pp.).
6. Zhang A. On the mechanism and optimization of triboelectric nanogenerators / A. Zhang, W. Liu, Y. Zhang // Nanotechnology. – 2015. – Vol. 26, № 42. – P. 425401 (7 pp.).
7. Graphene/elastomer composite-based photo-thermal nanopositioners / [J. Loomis, X. Fan, F. Khosravi et al.] // Scientific Reports. – 2013. – Vol. 3. – P. 1900 (10 pp.).
8. Zhang Y. Novel nano bearings constructed by physical adsorption / Y. Zhang // Scientific Reports. – 2015. – Vol. 5. – P. 14539 (14 pp.).
9. Peplow M. March of the machines / M. Peplow // Nature. – 2015. – Vol. 525, № 7567. – P. 18–21.

10. Nanolubrication: characterization of patterned lubricant films on magnetic hard disks / [S. Guddati, J. Zhang, S. K. Sinha, S. M. Hsu] // Tribology Letters. – 2006. – Vol. 21, № 3. – P. 253–261.
11. Persson B. N. J. Sliding friction. Physical principles and applications / B. N. J. Persson. – Berlin : Springer-Verlag, 2000. – 515 p.
12. Yoshizawa H. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-slip friction of spherical and chain molecules / H. Yoshizawa, J. Israelachvili // The Journal of Physical Chemistry. – 1993. – Vol. 97, № 43. – P. 11300–11313.
13. Braun O. M. Nanotribology: microscopic mechanisms of friction / O. M. Braun, A. G. Naumovets // Surface Science Reports. – 2006. – Vol. 60, № 6-7. – P. 79–158.
14. Israelachvili J. N. Intermolecular and surface forces, 3-rd edition / J. N. Israelachvili. – USA: Academic Press, 2011. – 674 p.
15. Zhang J. Boundary lubrication by adsorption film / J. Zhang, Y. Meng // Friction. – 2015. – Vol. 3, № 2. – P. 115–147.
16. Liechi K. M. Understanding friction in layered materials / K. M. Liechi // Science. – 2015. – Vol. 348, № 6235. – P. 632–633.
17. Effect of chemically adsorbed molecules on the viscous friction of nanometer-thick liquid lubricant films coated on a diamond-like carbon surface / [S. Itoh, Y. Norizuki, K. Fukuzawa, H. Zhang] // Tribology Letters. – 2015. – Vol. 60, № 1. – P. 6–14.
18. The boundary lubrication of chemically grafted and cross-linked hyaluronic acid in phosphate buffered saline and lipid solutions measured by the surface forces apparatus / [J. Yu, X. Banquy, G. W. Greene et al.] // Langmuir. – 2012. – Vol. 28, № 4. – P. 2244–2250.
19. Filippov A. E. Friction through dynamical formation and rupture of molecular bonds / A. E. Filippov, J. Klafter, M. Urbakh // Physical Review Letters. – 2004. – Vol. 92, № 13. – P. 135503 (4 pp.).
20. Хоменко А. В. Синергетика фазовых и кинетических переходов в низкоразмерных системах. Физические основы, концепции, методы / А. В. Хомен-

- ко. – Saarbrücken, Deutschland/Германия : Palmarium Academic Publishing, 2015. – 328 с.
21. Ландау Л. Д. Теоретическая физика: Учебное пособие: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – Москва : Наука, 1976. – Т. 5 : Статистическая физика. Ч. 1. Изд. 3, испр. – 1976. – 584 с.
 22. Олемской А. И. Теория стохастических систем с сингулярным мультипликативным шумом / А. И. Олемской // Успехи физических наук. – 1998. – Т. 168, № 3. – С. 287–321.
 23. Marginal dimensions for multicritical phase transitions / [M. Dudka, R. Folk, Yu. Holovatch et al.] // Condensed Matter Physics. – 2012. – Vol. 15, № 3. – P. 43001 (10 pp.).
 24. Numerical recipes in C: the art of scientific computing / [W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky et al.] – New York : Cambridge University Press, 1992. – 1020 p.
 25. Popov V. L. Method of dimensionality reduction in contact mechanics and friction / V. L. Popov, M. Heß. – Berlin : Springer Verlag, 2015. – 265 p.
 26. Popov V. L. Method of dimensionality reduction in contact mechanics and friction: a users handbook. I. Axially-symmetric contacts / V. L. Popov, M. Heß // Facta Universitatis, Series: Mechanical Engineering. – 2014. – Vol. 12, № 1. – P. 1–14.
 27. Lyashenko I. A. Adhesive impact of an elastic sphere with an elastic half space: Numerical analysis based on the method of dimensionality reduction / I. A. Lyashenko, E. Willert, V. L. Popov // Mechanics of Materials. – 2016. – Vol. 92. – P. 155–163.
 28. Lyashenko I. A. Impact of an elastic sphere with an elastic half space revisited: Numerical analysis based on the method of dimensionality reduction / I. A. Lyashenko, V. L. Popov // Scientific Reports. – 2015. – Vol. 5. – P. 8479 (5 pp).
 29. Lyashenko I. A. Taking into account the universal dependence of the viscosity of a boundary lubricant on temperature and strain rate to describe stop-start

- experiments / I. A. Lyashenko, A. M. Zaskoka // *Technical Physics*. – 2015. – Vol. 60, № 7. – P. 1014–1020. (Ляшенко Я. А. Учет универсальной зависимости вязкости граничной смазки от температуры и скорости деформаций при описании особенностей stop-start-экспериментов / Я. А. Ляшенко, А. Н. Заскока // *Журнал технической физики*. – 2015. – Т. 85, № 7. – С. 69–76.)
30. Динамическое моделирование спонтанных колебаний в процессе наноструктурирующего выглаживания / [Я. А. Ляшенко, В. П. Кузнецов, М. Попов и др.] // *Физическая мезомеханика*. – 2015. – Т. 18, № 1. – С. 38–42.
31. Lyashenko I. A. Stick-slip regime of melting of boundary lubrication taking into account spatial inhomogeneity / I. A. Lyashenko // *Technical Physics*. – 2014. – Vol. 59, № 7. – P. 945–950. (Ляшенко Я. А. Прерывистый режим плавления граничной смазки с учетом пространственной неоднородности / Я. А. Ляшенко // *Журнал технической физики*. – 2014. – Т. 84, № 7. – С. 1–7.)
32. Заскока А. Н. Учет температурной зависимости вязкости неньютоновских смазок в модели граничного трения при фазовом переходе второго рода / А. Н. Заскока, Я. А. Ляшенко // *Физическая мезомеханика*. – 2014. – Т. 17, № 2. – С. 93–100.
33. Lyashenko I. A. Comment on "Friction between a viscoelastic body and a rigid surface with random self-affine roughness" / I. A. Lyashenko, L. Pastewka, B. N. J. Persson // *Physical Review Letters*. – 2013. – Vol. 111, № 18. – P. 189401 (1 p.).
34. Lyashenko I. A. On the validity of the method of reduction of dimensionality: area of contact, average interfacial separation and contact stiffness / I. A. Lyashenko, L. Pastewka, B. N. J. Persson // *Tribology Letters*. – 2013. – Vol. 52, № 2. – P. 223–229.
35. Lyashenko I. A. Hysteresis behavior in the stick-slip mode at the boundary friction / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, A. M. Zaskoka // *Tribology Transactions*. – 2013. – Vol. 56, № 6. – P. 1019–1026.
36. Lyashenko I. A. Effect of the temperature dependence of the viscosity of pseudoplastic lubricants on the boundary friction regime / I. A. Lyashenko //

- Technical Physics. – 2013. – Vol. 58, № 7. – P. 1016–1024. (Ляшенко Я. А. Влияние температурной зависимости вязкости псевдопластических смазок на режим граничного трения / Я. А. Ляшенко // Журнал технической физики. – 2013. – Т. 83, № 7. – С. 87–95.)
37. Lyashenko I. A. Stick-slip melting of a boundary lubricant between two rigid surfaces with nanoscale asperities / I. A. Lyashenko, I. V. Vinnichenko // Technical Physics. – 2013. – Vol. 58, № 9. – P. 1329–1336. (Ляшенко Я. А. Прерывистый режим плавления граничной смазки между двумя жесткими поверхностями с наноразмерными неровностями / Я. А. Ляшенко, И. В. Винниченко // Журнал технической физики. – 2013. – Т. 83, № 9. – С. 90–97.)
38. Lyashenko I. A. Stick-slip mode of boundary friction as the first-order phase transition / I. A. Lyashenko, A. M. Zaskoka // Ukrainian Journal of Physics. – 2013. – Vol. 58, № 1. – P. 91–102. (Ляшенко Я. О. Перерывчастий режим межового тертя як фазовий перехід першого роду / Я. О. Ляшенко, А. М. Заскока // Український фізичний журнал. – 2013. – Т. 58, № 1. – С. 92–103.)
39. Lyashenko I. A. Melting of the ultrathin lubricant film between atomically-flat solid surfaces as second-order phase transition / I. A. Lyashenko, A. M. Zaskoka // Journal of Physical Studies. – 2013. – Vol. 17, № 1. – P. 1002 (7 pp.). (Ляшенко Я. О. Плавлення ультратонкої плівки мастила між атомарно-гладкими твердими поверхнями як фазовий перехід другого роду / Я. О. Ляшенко, А. М. Заскока // Журнал фізичних досліджень. – 2013. – Т. 17, № 1. – С. 1002 (7 с.).)
40. Khomenko A. V. Statistical theory of the boundary friction of atomically flat solid surfaces in the presence of a lubricant layer / A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko // Physics-USpekhi. – 2012. – Vol. 55, № 10. – P. 1008–1034. (Хоменко А. В. Статистическая теория граничного трения атомарно-гладких твердых поверхностей при наличии смазочного слоя / А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко // Успехи физических наук. – 2012. – Т. 182, № 10. – С. 1081–1110.)
41. Lyashenko I. A. Thermodynamic theory of two rough surfaces friction in the boundary lubrication mode / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko // Tribology

- Letters. – 2012. – Vol. 48, № 1. – P. 63–75.
42. A model of grain boundary sliding during deformation [L. S. Metlov, M. M. Myshlyaev, A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko] // Technical Physics Letters. – 2012. – Vol. 38, № 11. – P. 972–974. (Модель скольжения по границам зерен в процессе деформации / [Л. С. Метлов, М. М. Мышляев, А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко] // Письма в журнал технической физики. – 2012. – Т. 38, № 21. – С. 28–33.)
43. Lyashenko I. A. First-order phase transition between the liquidlike and solidlike structures of a boundary lubricant / I. A. Lyashenko // Technical Physics. – 2012. – Vol. 57, № 1. – P. 17–26. (Ляшенко Я. А. Фазовый переход первого рода между жидкоподобной и твердоподобной структурами граничной смазки / Я. А. Ляшенко // Журнал технической физики. – 2012. – Т. 82, № 1. – С. 19–28.)
44. Nonequilibrium kinetics of phase transitions in the boundary friction mode [I. A. Lyashenko, L. S. Metlov, A. V. Khomenko, S. N. Cherpulskyi] // Journal of Friction and Wear. – 2012. – Vol. 33, № 4. – P. 244–252. (Неравновесная кинетика фазовых переходов в режиме граничного трения / [Я. А. Ляшенко, Л. С. Метлов, А. В. Хоменко, С. Н. Чепульский] // Трение и износ. – 2012. – Т. 33, № 4. – С. 295–306.)
45. Lyashenko I. A. Thermodynamics and kinetics of boundary friction / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, L. S. Metlov // Tribology International. – 2011. – Vol. 44, № 4. – P. 476–482.
46. Metlov L. S. Multidimensional thermodynamic potential for descriptions of ultrathin lubricant film melting between two atomically smooth surfaces / L. S. Metlov, A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko // Condensed Matter Physics. – 2011. – Vol. 14, № 1. – P. 13001 (11 pp.).
47. Lyashenko I. A. Tribological properties of dry, fluid, and boundary friction / I. A. Lyashenko // Technical Physics. – 2011. – Vol. 56, № 5. – P. 701–707. (Ляшенко Я. А. Трибологические свойства режимов сухого, жидкостного и граничного трения / Я. А. Ляшенко // Журнал технической физики. – 2011.

- Т. 81, № 5. – С. 115–121.)
48. Lyashenko I. A. Tribological system in the boundary friction mode under a periodic external action / I. A. Lyashenko // *Technical Physics*. – 2011. – Vol. 56, № 6. – P. 869–876. (Ляшенко Я. А. Трибологическая система в режиме граничного трения под периодическим внешним воздействием / Я. А. Ляшенко // *Журнал технической физики*. – 2011. – Т. 81, № 6. – С. 125–132.)
49. Lyashenko I. A. Nonlinear thermodynamic model of boundary friction / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, L. S. Metlov // *Journal of Friction and Wear*. – 2011. – Vol. 32, № 2. – P. 113–123. (Ляшенко Я. А. Нелинейная термодинамическая модель граничного трения / Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко, Л. С. Метлов // *Трение и износ*. – 2011. – Т. 32, № 2. – С. 157–170.)
50. Lyashenko I. A. Phenomenological theory of boundary friction in the stick-slip mode / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, L. S. Metlov // *Ukrainian Journal of Physics*. – 2011. – Vol. 56, № 3. – P. 278–286. (Ляшенко Я. О. Феноменологічна теорія переривчастого режиму межового тертя / Я. О. Ляшенко, О. В. Хоменко, Л. С. Метлов // *Український фізичний журнал*. – 2011. – Т. 56, № 3. – С. 278–286.)
51. Non-equilibrium stationary modes of boundary friction / [I. A. Lyashenko, L. S. Metlov, A. V. Khomenko, S. N. Chepulskyi] // *Journal of Nano- and Electronic Physics*. – 2011. – Vol. 3, № 3. – P. 58–66. (Неравновесные стационарные режимы граничного трения / [Я. А. Ляшенко, Л. С. Метлов, А. В. Хоменко, С. Н. Чепульский] // *Журнал нано- и электронной физики*. – 2011. – Т. 3, № 3. – С. 59–69.)
52. Ляшенко Я. А. Гистерезисные явления граничного трения / Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко, Л. С. Метлов // *Физика и техника высоких давлений*. – 2011. – Т. 21, № 2. – С. 67–80.
53. Lyashenko I. A. Phenomenological theory for the melting of a thin lubricant film between two atomically smooth solid surfaces / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, L. S. Metlov // *Technical Physics*. – 2010. – Vol. 55, № 8. – P. 1193–1199. (Ляшенко Я. А. Феноменологическая теория плавления тон-

- кой пленки смазки между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями / Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко, Л. С. Метлов // Журнал технической физики. – 2010. – Т. 80, № 8. – С. 120–126.)
54. Non-equilibrium evolutionary thermodynamics of boundary friction / [L. S. Metlov, A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko, S. N. Cherpulskyi] // Journal of Nano- and Electronic Physics. – 2010. – Vol. 2, № 2. – P. 120–133. (Неравновесная эволюционная термодинамика граничного трения / [Л. С. Метлов, А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко, С. Н. Чепульский] // Журнал нано- и электронной физики. – 2010. – Т. 2, № 2. – С. 79–93.)
55. Borysiuk V. Modeling of the elastic properties of the core-shell Au-Ag nanorod / V. Borysiuk, I. Lyashenko // Proceedings of the International scientific conference [”Electronics and Nanotechnology“], (Kyiv, 19–21 April 2016). – Kyiv, 2016. – P. 118–120.
56. Lyashenko I. A. Interrupted mode of the boundary friction in the model of shear melting with asymmetric potential / I. A. Lyashenko, A. M. Zaskoka // Proceedings of the International scientific conference [”Electronics and Nanotechnology“], (Kyiv, 21–24 April 2015). – Kyiv, 2015. – P. 252–255.
57. Zaskoka A. M. Boundary friction thermodynamic model of ultrathin lubricant film confined between two atomically smooth solid surfaces / A. M. Zaskoka, I. A. Lyashenko // Proceedings of the International scientific conference [”Electronics and Nanotechnology“], (Kyiv, 15–18 April 2014). – Kyiv, 2014. – P. 219–222.
58. Zaskoka A. M. The viscosity temperature dependence in the boundary friction model under a periodic external action / A. M. Zaskoka, I. A. Lyashenko // Proceedings of the International conference ”Nanomaterials: Applications and Properties“. – 2014. – Vol. 3, № 1. – P. 01NTF18 (3 pp).
59. Hysteresis phenomena in the stick-slip motion at the boundary friction mode / [I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, A. M. Zaskoka, K. S. Zhmaka] // Proceedings of the International conference ”Nanomaterials: Applications and Properties“. – 2013. – Vol. 2, № 1. – P. 01NTF04 (4 pp.).

60. Влияние давления на тип фазового перехода между кинетическими режимами граничного трения / [Я. А. Ляшенко, Л. С. Метлов, А. В. Хоменко, С. Н. Чепульский] // Матеріали п'ятої Міжнародної наукової конференції "Фізико-хімічні основи формування і модифікації мікро- та наноструктур". – 2011. – Т. 2. – С. 392-395.
61. Lyashenko I. A. Friction force for boundary lubrication / I. A. Lyashenko // Proceedings of the International conference "Nanomaterials: Applications and Properties". – 2011. – Vol. 1, № 1. – P. 7–14.
62. Ляшенко Я. А. Трибологическая система в режиме граничного трения / Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко, Л. С. Метлов // Матеріали четвертої Міжнародної наукової конференції ["Фізико-хімічні основи формування і модифікації мікро- та наноструктур"], (Харків, 6–8 жовтня 2010 р.). – С. 109–113.
63. Dynamical modelling of surface profiles after nanostructuring burnishing / [I. A. Lyashenko, V. P. Kuznetsov, M. Popov et al.] // Abstracts of Trilateral German-Ukrainian-Russian Workshop ["Analysis and control of surface modification applied to machinery parts under severe plastic deformations"], (Berlin, Germany, 13-14 October 2015). – Berlin, 2015. – P. 5.
64. Lyashenko I. Thermodynamic representation of boundary friction mode / I. Lyashenko // Abstracts of the German-Russian Workshop ["Tribology in aerospace applications: damping, wear and structural dynamics in aerospace systems"], (Berlin, Germany, 6–10 October 2014). – Berlin, 2014. – P. 12.
65. Ляшенко Я. А. Учет пространственной неоднородности в термодинамической модели граничного трения / Я. А. Ляшенко // Збірка тез школи-семінару ["Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах"], (Суми, 21–22 жовтня 2014 р.). – Суми, 2014. – С. 31.
66. Заскока А. Вплив температурної залежності в'язкості мастила на межовий режим тертя / А. Заскока, Я. О. Ляшенко // Збірка тез 14-ї Всеукраїнської школи-семінару та конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України, (Львів, 4–6 червня 2014 р.). – Львів, 2014. – С. 35.

67. Zaskoka A. M. Hysteresis behavior of nanotribological system in the boundary friction mode / A. M. Zaskoka, I. A. Lyashenko // Abstracts book of IV International conference for young scientists ["Low temperature physics – 2013"], (Kharkov, 3–7 June 2013). – Kharkov, 2013. – P. 100.
68. Дослідження явища гістерезису в нанотрибологічних системах / [А. М. Заскока, Я. О. Ляшенко, О. В. Хоменко, І. О. Бережна] // Збірник тез Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів ["ІЕФ – 2013"], (Ужгород, 20-23 травня 2013 р.). – Ужгород, 2013. – С. 230.
69. Заскока А. Поведінка трибологічної системи в режимі межового тертя при фазовому переході другого роду / А. Заскока, Я. Ляшенко // Програма і тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ["ЕВРИКА-2013"], (Львів, 15–17 травня 2013 р.). – Львів, 2013. – С. А10.
70. Lyashenko I. Stick-slip motion at friction of two rough surfaces in the boundary lubrication mode / I. Lyashenko, A. Khomenko, A. Zaskoka // Programme and abstracts of the 4-th conference ["Statistical physics: Modern trends and applications"], (Lviv, 3–6 July 2012). – Lviv, 2012. – P. 141.
71. Модель скольжения по границам зерен в процессе деформации / [Л. С. Метлов, М. М. Мышляев, А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко] // Тезисы 12-й Международной конференции ["Высокие давления 2012. Фундаментальные и прикладные аспекты"], (Судак, 23–27 сентября 2012 г.). – Судак, 2012. – С. 50.
72. Ляшенко Я. А. Термодинамическая модель граничного трения с учетом температурной зависимости вязкости / Я. А. Ляшенко // Збірник матеріалів та програма конференції ["Десята відкрита наукова конференція інституту прикладної математики та фундаментальних наук (ІМФН)"], (Львів, 17–18 травня 2012 р.). – Львів, 2012. – С.7–8.
73. Ляшенко Я. Тертя двох шорстких поверхонь при наявності ультратонкої плівки мастила між ними / Я. Ляшенко // Збірник тез Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ["ЕВРИКА–2012"], (Львів, 19–22 квітня 2012 р.). – Львів, 2012. – С. А16.

74. Ляшенко Я. Нелінійна термодинамічна теорія межового тертя / Я. Ляшенко // Збірка тез 11-ої Всеукраїнської школи-семінару і конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Інституту фізики конденсованих систем НАН України, (Львів, 1–3 червня 2011 р.). – Львів, 2011. – С. 21.
75. Ляшенко Я. А. Термодинамическая модель фазовых переходов в ультратонкой пленке смазки / Я. А. Ляшенко // Abstracts of XV International conference reports [”Dynamical system modelling and stability investigation“], (Kiev, 25–27 May 2011). – Kiev, 2011. – P. 193.
76. Lyashenko I. A. Friction map for stick-slip mode in boundary regime / I. A. Lyashenko // Conference programme and abstract book of the International conference for young scientists [”Low temperature physics“], (Kharkov, 6–10 June 2011). – Kharkov, 2011. – P. 152.
77. Lyashenko I. A. Friction process at ultrathin lubricant film melting / I. A. Lyashenko // Program and materials of the Mediterranean – East-Europe Meeting [”Multifunctional nanomaterials: NanoEuroMed 2011“], (Uzhgorod, 12–14 May 2011). – Uzhgorod, 2011. – P. 108.
78. Ляшенко Я. О. Трибологічні властивості межового тертя / Я. О. Ляшенко // Тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики [”ЕВРИКА–2011“], (Львів, 18–20 травня 2011 р.). – Львів, 2011. – С. В14.
79. Lyashenko I. A. Thermodynamics and kinetics of boundary friction / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, L. S. Metlov // Abstracts of the International conference [”Physics of liquid matter: Modern problems“], (Kyiv, 21–24 May 2010). – Kyiv, 2010. – P. 152.
80. Ляшенко Я. А. Динамическая модель плавления тонкого слоя смазки / Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко, Л. С. Метлов // Conference program and Abstract book of the International conference for young scientists [”Low temperature physics“], (Kharkov, 7–11 June 2010). – Kharkov, 2010. – P. 147.
81. Неравновесная эволюционная термодинамика сверхпластичности /

- [Л. С. Метлов, А. В. Хоменко, Я. А. Ляшенко и др.] // Тезисы 11-й Международной конференции [”Высокие давления 2010. Фундаментальные и прикладные аспекты“], (Судак, 26–30 сентября 2010 г.). – Судак, 2010. – С. 124.
82. Ляшенко Я. Термодинамічна модель переривчастих кінетичних режимів межового тертя / Я. Ляшенко, О. Хоменко, Л. Метлов // Тези доповідей Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики [”ЕВРИКА–2010“], (Львів, 19–21 травня 2010 р.). – Львів, 2010. – С. В12.
83. Tabor D. The direct measurement of normal and retarded van der waals forces / D. Tabor, R. H. S. Winterton // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. – 1969. – Vol. 312, № 1511. – P. 435–450.
84. Israelachvili J. N. The measurement of van der waals dispersion forces in the range of 1.5 to 130 nm / J. N. Israelachvili, D. Tabor // Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences. – 1972. – Vol. 331, № 1584. – P. 19–38.
85. Israelachvili J. N. Measurement of friction between two mica surfaces in aqueous electrolyte solutions in the range 0–100 nm / J. N. Israelachvili, G. E. Adams // Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 1: Physical Chemistry in Condensed Phases. – 1978. – Vol. 74. – P. 975–1001.
86. Israelachvili J. N. Dynamic properties of molecularly thin liquid films / J. N. Israelachvili, P. M. McGuiggan, A. M. Homola // Science. – 1988. – Vol. 240, № 4849. – P. 189–191.
87. Israelachvili J. Adhesion forces between surfaces in liquids and condensable vapours / J. Israelachvili // Surface Science Reports. – 1992. – Vol. 14, № 3. – P. 109–159.
88. Lee D. W. Stick-slip friction and wear of articular joints / D. W. Lee, X. Banquy, J. N. Israelachvili // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. – 2013. – Vol. 110, № 7. – P. E567–E574.

89. Israelachvili J. N. Adhesion and short-range forces between surfaces. Part 1: New apparatus for surface force measurements / J. N. Israelachvili, P. M. McGuiggan // *Journal of Materials Research*. – 1990. – Vol. 5, № 10. – P. 2223–2231.
90. A new tribological experimental setup to study confined and sheared monolayers / [L. Fu, D. Favier, T. Charitat et al.] // *Review of Scientific Instruments*. – 2016. – Vol. 87, № 3. – P. 033903 (7 pp.).
91. Israelachvili J. N. Thin film studies using multiple-beam interferometry / J. N. Israelachvili // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 1973. – Vol. 44, № 2. – P. 259–272.
92. Chen Y. L. Mechanism of cavitation damage in thin liquid films: Collapse damage vs. inception damage / Y. L. Chen, T. Kuhl, J. Israelachvili // *Wear*. – 1992. – Vol. 153, № 1. – P. 31–51.
93. Heuberger M. Topographic information from multiple beam interferometry in the surface forces apparatus / M. Heuberger, G. Luengo, J. Israelachvili // *Langmuir*. – 1997. – Vol. 13, № 14. – P. 3839–3848.
94. Pashley R. M. Hydration forces between mica surfaces in aqueous electrolyte solutions / R. M. Pashley // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 1981. – Vol. 80, № 1. – P. 153–162.
95. Pashley R. M. DLVO and hydration forces between mica surfaces in Li⁺, Na⁺, K⁺ and Cs⁺ electrolyte solutions: A correlation of double-layer and hydration forces with surface cation exchange properties / R. M. Pashley // *Journal of Colloid and Interface Science*. – 1981. – Vol. 83, № 2. – P. 531–546.
96. Horn R. G. Surface forces and viscosity of water measured between silica sheets / R. G. Horn, D. T. Smith, W. Haller // *Chemical Physics Letters*. – 1989. – Vol. 162, № 4-5. – P. 404–408.
97. Horn R. G. Direct measurement of surface forces between sapphire crystals in aqueous solutions / R. G. Horn, D. R. Clarke, M. T. Clarkson // *Journal of Materials Research*. – 1988. – Vol. 3, № 3. – P. 413–416.
98. Direct measurement of molecular level adhesion forces between biaxially oriented

- solid polymer films [W. W. Merrill, A. V. Pocius, B. V. Thakker, M. Tirrell] // *Langmuir*. – 1991. – Vol. 7, № 9. – P. 1975–1980.
99. Dhinojwala A. Surface forces in the tapping mode: Solvent permeability and hydrodynamic thickness of adsorbed polymer brushes / A. Dhinojwala, S. Granick // *Macromolecules*. – 1997. – Vol. 30, № 4. – P. 1079–1085.
100. Helm C. A. Molecular mechanisms and forces involved in the adhesion and fusion of amphiphilic bilayers / C. A. Helm, J. N. Israelachvili, P. M. McGuiggan // *Science*. – 1989. – Vol. 246, № 4932. – P. 919–922.
101. Self-assembled monolayers on mica for experiments utilizing the surface forces apparatus [J. Peanasky, H. M. Schneider, S. Granick, C. R. Kessel] // *Langmuir*. – 1995. – Vol. 11, № 3. – P. 953–962.
102. Confinement-induced film thickness transitions in liquid crystals between two alkanethiol monolayers on gold / [M. Ruths, M. Heuberger, V. Scheumann et al.] // *Langmuir*. – 2001. – Vol. 17, № 20. – P. 6213–6219.
103. Kleshchonok A. V. Spatially modulated structures in nematic colloids: Statistical thermodynamics and kinetics / A. V. Kleshchonok, V. Yu. Reshetnyak, V. A. Tatarenko // *The European Physical Journal E*. – 2011. – Vol. 34, № 3. – P. 33–42.
104. Measurement and characterization of “resonance friction” at high sliding speeds in a model automotive wet clutch [X. Banquy, D. D. Lowrey, N. Belman et al.] // *Tribology Letters*. – 2011. – Vol. 43, № 2. – P. 185–195.
105. Применение микро- и нанозондов для анализа малоразмерных 3D материалов, наносистем и нанообъектов / [А. Д. Погребняк, А. Г. Пономарев, А. П. Шпак, Ю. А. Куницкий] // *Успехи физических наук*. – 2012. – Т. 182, № 3. – С. 287–321.
106. Velocity dependence of atomic friction / [E. Gnecco, R. Bennewitz, T. Gyalog et al.] // *Physical Review Letters*. – 2000. – Vol. 84, № 6-7. – P. 1172 (4 pp.).
107. Reich R. The effectiveness of boundary and hydrodynamic lubrication when cold rolling aluminum metal / R. Reich, J. Wise, R. Colbert // *Tribology Transactions*. – 2008. – Vol. 51, № 5. – P. 627–635.

108. Carson G. Molecular tribology of fluid lubrication: shear thinning / G. Carson, H. -W. Hu, S. Granick // Tribology Transactions. – 1992. – Vol. 35, № 3. – P. 405–410.
109. Parameter-free dissipation in simulated sliding friction / [A. Benassi, A. Vanossi, G. E. Santoro, E. Tosatti] // Physical Review B. – 2010. – Vol. 82, № 8. – P. 081401(R) (4 pp.).
110. Dao T. T. Stick-slip dynamics of entagled polymer liquids / T. T. Dao, L. A. Archer // Langmuir. – 2002. – Vol. 18, № 7. – P. 2616–2624.
111. Bowden F. P. The friction and lubrication of solids / F. P. Bowden, D. Tabor. – New York : Oxford University Press, 1950. – 337 p.
112. Rabinowicz E. Friction and wear of materials, 2-nd ed. / E. Rabinowicz. – New York : John Wiley and Sons, 1995. – 336 p.
113. Baumberger T. Crossover from creep to inertial motion in friction dynamics / T. Baumberger, F. Heslot, B. Perrin // Nature. – 1994. – Vol. 367, № 6463. – P. 544–546.
114. Creep, stick–slip, and dry-friction dynamics: Experiments and a heuristic model / [F. Heslot, T. Baumberger, B. Perrin et al.] // Physical Review E. – 1994. – Vol. 49, № 6. – P. 4973–4988.
115. Rabinowicz E. The intrinsic variables affecting the stick–slip process / E. Rabinowicz // Proceedings of the Physical Society. – 1958. – Vol. 71, № 4. – P. 668–675.
116. Studies in Lubrication: XII. Friction behavior during the slip portion of the stick-slip process [J. B. Sampson, F. Morgan, D. W. Reed, M. Muskat] // Journal of Applied Physics. – 1943. – Vol. 14, № 12. – P. 689–700.
117. Heymann F. Friction apparatus for very low-speed sliding studies / F. Heymann, E. Rabinowicz, B. Rightmire // Review of Scientific Instruments. – 1955. – Vol. 26, № 1. – P. 56–58.
118. Tomlinson G. A. A molecular theory of friction / G. A. Tomlinson // Philosophical Magazine Series 7. – 1929. – Vol. 7, № 46. – P. 905–939.
119. Carlson J. M. Mechanical model of an earthquake fault / J. M. Carlson,

- J. S. Langer // *Physical Review A*. – 1989. – Vol. 40, № 11. – P. 6470–6484.
120. Persson B. N. J. Theory of friction: The role of elasticity in boundary lubrication / B. N. J. Persson // *Physical Review B*. – 1994. – Vol. 50, № 7. – P. 4771–4786.
121. Попов В. Л. Термодинамика и кинетика плавления сдвигом тонкого слоя смазки, заключенного между твердыми телами / В. Л. Попов // *Журнал технической физики*. – 2001. – Т. 71, № 5. – С. 100–110.
122. Остермайер Г. П. Описание индуцированных температурой и сдвигом переходов "твердое тело – жидкость" методом мезочастиц / Г. П. Остермайер, В. Л. Попов // *Физическая мезомеханика*. – 2000. – Т. 3, № 5. – С. 33–37.
123. Nasuno S. Friction in granular layers: Hysteresis and precursors / S. Nasuno, A. Kudrolli, J. P. Gollub // *Physical Review Letters*. – 1997. – Vol. 79, № 5. – P. 949–952.
124. Drummond C. Dynamic phase transitions in confined lubricant fluids under shear / C. Drummond, J. Israelachvili // *Physical Review E*. – 2001. – Vol. 63, № 4. – P. 041506 (11 pp.).
125. Thompson P. A. Origin of stick-slip motion in boundary lubrication / P. A. Thompson, M. O. Robbins // *Science*. – 1990. – Vol. 250, № 4982. – P. 792–794.
126. Robbins M. O. Critical velocity of stick-slip motion / M. O. Robbins, P. A. Thompson // *Science*. – 1991. – Vol. 253, № 5022. – P. 916.
127. Liquid dynamics in molecularly thin films / [J. Israelachvili, P. McGuiggan, M. Gee et al.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1990. – Vol. 2, Supplement 1. – P. SA89–SA98.
128. Thompson P. A. Phase transitions and universal dynamics in confined films / P. A. Thompson, G. S. Grest, M. O. Robbins // *Physical Review Letters*. – 1992. – Vol. 68, № 23. – P. 3448–3451.
129. Bordarier P. Stick-slip phase transitions in confined solidlike films from an equilibrium perspective / P. Bordarier, M. Schoen, A. Fuchs // *Physical Review E*. – 1998. – Vol. 57, № 2. – P. 1621–1635.

130. Investigation on the molecular shear-induced organization in a molecularly thin film of N-hexadecane / [E. Charrault, X. Banquy, K. Kristiansen et al.] // Tribology Letters. – 2013. – Vol. 50, № 3. – P. 421–430.
131. Carlson J. M. Constitutive relation for the friction between lubricated surfaces / J. M. Carlson, A. A. Batista // Physical Review E. – 1996. – Vol. 53, № 4. – P. 4153–4165.
132. Drummond C. Behavior of adhesive boundary lubricated surfaces under shear: A new dynamic transition / C. Drummond, J. Elezgaray, P. Richetti // Europhysics Letters. – 2002. – Vol. 58, № 4. – P. 503–509.
133. Liquid to solidlike transitions of molecularly thin films under shear / [M. L. Gee, P. M. McGuiggan, J. N. Israelachvili, A. M. Homola] // The Journal of Chemical Physics. – 1990. – Vol. 93, № 3. – P. 1895–1906.
134. Luengo G. Generalized effects in confined fluids: new friction map for boundary lubrication / G. Luengo, J. Israelachvili, S. Granick // Wear. – 1996. – Vol. 200, № 1–2. – P. 328–335.
135. Granick S. Motions and relaxations of confined liquids / S. Granick // Science. – 1991. – Vol. 253, № 5026. – P. 1374–1379.
136. Urbakh M. Dynamics of confined liquids under shear / M. Urbakh, L. Daikhin, J. Klafter // Physical Review E. – 1995. – Vol. 51, № 3. – P. 2137–2141.
137. Pipkin A. C. Lectures in viscoelastic theory / A. C. Pipkin. – New York : Springer-Verlag, 1972. – 180 p.
138. Li L. Molecular dynamics simulation of condensation on nanostructured surface in a confined space / L. Li, P. Ji, Y. Zhang // Applied Physics A. – 2016. – Vol. 122, № 5. – P. 496 (15 pp.).
139. Rapaport D. C. The art of molecular dynamics simulation / D. C. Rapaport – Cambridge : Cambridge University Press, 2004. – 549 p.
140. Popov V. L. Prandtl-Tomlinson model: history and applications in friction, plasticity, and nanotechnologies / V. L. Popov, J. A. T. Gray // ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics (Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik). – 2012. – Vol. 92, № 9. – P. 683–708.

141. Prandtl L. Ein Gedankenmodell zur kinetischen Theorie der festen Körper / L. Prandtl // ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics (Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik). – 1928. – Vol. 8, № 2. – P. 85–106.
142. Конторова Т. А. К теории пластической деформации и двойникования, Ч. 1 / Т. А. Конторова, Я. И. Френкель // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1938. – Т. 8, № 1. – С. 89–95.
143. Weiss M. Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: static properties / M. Weiss, F. -J. Elmer // Physical Review B. – 1996. – Vol. 53, № 11. – P. 7539–7549.
144. Weiss M. Dry friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson model: dynamical properties / M. Weiss, F. -J. Elmer // Zeitschrift für Physik B Condensed Matter. – 1996. – Vol. 104, № 1. – P. 55–69.
145. Dynamical transitions in correlated driven diffusion in a periodic potential / [O. M. Braun, T. Dauxois, M. V. Paliy, M. Peyrard] // Physical Review Letters. – 1997. – Vol. 78, № 7. – P. 1295.
146. Braun O. M. Hysteresis in the underdamped driven Frenkel-Kontorova model / O. M. Braun, A. R. Bishop, J. Röder // Physical Review Letters. – 1997. – Vol. 79, № 19. – P. 3692.
147. Multichain Frenkel-Kontorova model for interfacial slip / [J. Röder, J. E. Hammerberg, B. L. Holian, A. R. Bishop] // Physical Review B. – 1998. – Vol. 57, № 5. – P. 2759.
148. Braun O. M. The Frenkel-Kontorova model: concepts, methods, and applications / O. M. Braun, Y. S. Kivshar. – Berlin : Springer-Verlag, 2004. – 472 p.
149. Batista A.A. Bifurcations from steady sliding to stick slip in boundary lubrication / A. A. Batista, J. M. Carlson // Physical Review E. – 1998. – Vol. 57, № 5. – P. 4986–4996.
150. Colloquium: modeling friction: from nanoscale to mesoscale / [A. Vanossi, M. Urbakh, S. Zapperi, E. Tosatti] // Reviews of Modern Physics. – 2013. –

- Vol. 85, № 2. – P. 529–552.
151. Popov V. L. A theory of the transition from static to kinetic friction in boundary lubrication layers / V. L. Popov // *Solid State Communications*. – 2000. – Vol. 115, № 7. – P. 369–373.
152. Thompson P. A. Shear flow near solids: Epitaxial order and flow boundary conditions / P. A. Thompson, M. O. Robbins // *Physical Review A*. – 1990. – Vol. 41, № 12. – P. 6830–6837.
153. Stick to slip transition and adhesion of lubricated surfaces in moving contact / [G. Reiter, A. L. Demirel, J. Peanasky et al.] // *Journal of Chemical Physics*. – 1994. – Vol. 101, № 3. – P. 2606–2615.
154. Попов В. Л. Термомеханическая модель кристаллических упругопластических сред / В. Л. Попов // *Письма в журнал технической физики*. – 1999. – Т. 25, № 20. – С. 31–38.
155. Kienle D. F. Density and phase state of a confined nonpolar fluid / D. F. Kienle, T. L. Kuhl // *Physical Review Letters*. – 2016. – Vol. 117, № 3. – P. 036101 (5 pp.).
156. Ландау Л. Д. К теории фазовых переходов. I / Л. Д. Ландау // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 1937. – Т. 7. – С. 19–32.
157. In: physics of sliding friction / [G. Reiter, A. L. Demirel, J. Peanasky et al.]; Eds. B. N. J. Persson, E. Tosatti. – Dordrecht : Kluver, 1995. – P. 119–138.
158. Seeger A. *Handbuch der Physik* / Ed. S. Flügge. Vol. VII/2. Berlin; Heidelberg; New York, 1958.
159. Demirel A. L. Transition from static to kinetic friction in a model lubricating system / A. L. Demirel, S. Granick // *Journal of Chemical Physics*. – 1998. – Vol. 109, № 16. – P. 6889–6897.
160. *Physics of sliding friction* / Ed. B. N. J. Persson, E. Tosatti. – Dordrecht : Kluver, 1996.
161. Khomenko A. V. Solid-liquid transition of ultrathin lubricant film / A. V. Khomenko, O. V. Yushchenko // *Physical Review E*. – 2003. – Vol. 68, № 3. – P. 036110 (6 pp.).

162. Манько Н. Н. Синергетическое представление прерывистого режима граничного трения: дис. . . . канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Манько Наталия Николаевна. — Сумы, 2015. — 128 с.
163. Khomenko A. V. Hysteresis phenomena at ultrathin lubricant film melting in the case of first-order phase transition / A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko // *Physics Letters A*. — 2007. — Vol. 366, № 1-2. — P. 165–173.
164. Brener E. A. Frictional shear cracks / E. A. Brener, V. I. Marchenko // *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*. — 2002. — Vol. 76, № 4. — P. 211–214.
165. Kaldasch J. Shear thickening in concentrated soft sphere colloidal suspensions: a shear induced phase transition / J. Kaldasch, B. Senge, J. Laven // *Journal of Thermodynamics*. — 2015. — Vol. 2015. — P. 153854 (10 pp.).
166. Chou T. Buckling instabilities of a confined colloid crystal layer / T. Chou, D. R. Nelson // *Physical Review E*. — 1993. — Vol. 48, № 6. — P. 4611–4621.
167. Иванченко Ю. М. Функционал Гинзбурга—Ландау для фазового перехода жидкость—пар / Ю. М. Иванченко, А. А. Лисянский // *Теоретическая и математическая физика*. — 1984. — Т. 58, № 1. — С. 146–155.
168. Васильев А. Н. Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике / А. Н. Васильев. — Санкт-Петербург : Изд-во ПИЯФ, 1998. — 774 с.
169. Phase separation in confined systems / [L. D. Gelb, K. E. Gubbins, R. Radhakrishnan, M. Sliwinska-Bartkowiak] // *Reports on Progress in Physics*. — 1999. — Vol. 62, № 12. — P. 1573–1659.
170. Radhakrishnan R. Free energy studies of freezing in slit pores: an order-parameter approach using Monte Carlo simulation / R. Radhakrishnan, K. E. Gubbins // *Molecular Physics: An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics*. — 1999. — Vol. 96, № 8. — P. 1249–1267.
171. Structure and solvation forces in confined alkane films / [F. Porcheron, B. Rousseau, M. Schoen, A. H. Fuchs] // *Physical Chemistry Chemical Physics*. — 2001. — Vol. 3, № 7. — P. 1155–1159.

172. Schoen M. Collective dynamics near a phase transition in confined fluids / M. Schoen, F. Porcheron // *The European Physical Journal E*. – 2003. – Vol. 12, Supplement 1. – P. 5–7.
173. Schoen M. Collective dynamics near fluid phase transitions / M. Schoen, F. Porcheron // *Physical Review E*. – 2003. – Vol. 67, № 5. – P. 051202 (5 pp.).
174. Depletion potentials near geometrically structured substrates / [P. Bryk, R. Roth, M. Schoen, S. Dietrich] // *Europhysics Letters*. – 2003. – Vol. 63, № 2. – P.233–239.
175. S. Sacquin. Fluid phase transitions at chemically heterogeneous, nonplanar solid substrates: Surface versus confinement effects / S. Sacquin, M. Schoen, A. H. Fuchs // *Journal of Chemical Physics*. – 2003. – Vol. 118, № 3. – P. 1453–1465.
176. Porcheron F. Monte Carlo simulation of a complex fluid confined to a pore with nanoscopically rough walls / F. Porcheron, M. Schoen // *The Journal of Chemical Physics*. – 2002. – Vol. 116, № 13. – P. 5816–5824.
177. Monte Carlo simulations of nanoconfined *n*-decane films / [F. Porcheron, B. Rousseau, A. H. Fuchsa, M. Schoen] // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 1999. – Vol. 17, № 1. – P. 4083–4090.
178. Wang F. The unique properties of the solid-like confined liquid films: a large scale molecular dynamics simulation approach / F. Wang, Y. Zhao // *Acta Mechanica Solida Sinica*. – 2011. – Vol. 24, № 2. – P. 101–116.
179. Dijkstra M. Confined thin films of linear and branched alkanes / M. Dijkstra // *Journal of Chemical Physics*. – 1997. – Vol. 107, № 8. – P. 3277–3288.
180. Landau theory for stress-induced order-disorder transitions in phase change materials / [M. Thielen, R. A. Nistor, D. Shakhvorostov et al.] // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 89, № 5. – P. 054101 (10 pp.).
181. Fish G. M. Phase behavior of liquid crystals in confinement: thesis ...mathematisch-naturwissenschaftlichen Doktorgrades "Doctor rerum naturalium" / Jonathan Michael Fish. – Göttingen, Germany, 2011. – 108 p.
182. Order reconstruction in a nanoconfined nematic liquid crystal between two

- coaxial cylinders / [X. Zhou, Z. Zhang, Q. Zhang, W. Ye] // *Materials*. – 2015. – Vol. 8, № 12. – P. 8072–8086.
183. Li H. Theory of phase transitions in disordered crystal solids: thesis ... doctor of philosophy / Huaming Li. – Atlanta, Georgia, USA, 2009. – 138 p.
184. Mahdi S. Landau theory of domain walls for one-dimensional asymmetric potentials / S. Mahdi, A. Saxena // *American Journal of Physics*. – 2003. – Vol. 71, № 10. – P. 1005–1012.
185. Tsoria Y. Surface induced ordering in thin film diblock copolymers: Tilted lamellar phases / Y. Tsoria, D. Andelman // *Journal of Chemical Physics*. – 2001. – Vol. 115, № 4. – P. 1970–1978.
186. Onuki A. Phase transitions of fluids in shear flow / A. Onuki // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1997. – Vol. 9, № 29. – P. 6119–6157.
187. Bock H. Thermomechanical properties of confined fluids exposed to a shear strain / H. Bock, M. Schoen // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2000. – Vol. 12. – P. 1545–1568.
188. Bock H. Shear-induced phase transitions in fluids confined between chemically decorated substrates / H. Bock, M. Schoen // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2000. – Vol. 12. – P. 1569–1594.
189. Самоорганизация в низкоразмерных системах / [Шпак А. П., Соболев О. В., Куницкий Ю. А., Черемской П. Г.]. – К. : ИМФ НАНУ, 2005. – 128 с.
190. Yoshizawa H. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 1. Relation between adhesion and friction / H. Yoshizawa, Y.-L. Chen, J. Israelachvili // *The Journal of Physical Chemistry*. – 1993. – Vol. 97, № 16. – P. 4128–4140.
191. Lemaître A. Boundary lubrication with a glassy interface / A. Lemaître, J. Carlson // *Physical Review E*. – 2004. – Vol. 69, № 6. – P. 061611 (18 pp.).
192. Lemaître A. Rearrangements and dilatancy for sheared dense materials / A. Lemaître // *Physical Review Letters*. – 2002. – Vol. 89, № 19. – P. 195503 (4 pp.).
193. Ахматов А. С. Молекулярная физика граничного трения / А. С. Ахматов. – Москва : Физматгиз, 1963. – 472 с.

194. Епифанов Г. И. Исследование зависимости силы трения от нормальной нагрузки и истинной площади трения / Г. И. Епифанов, Н. И. Минаев // Известия Высших учебных заведений. Физика. — 1959. — № 1. — С. 55.
195. Епифанов Г. И. Зависимость силы трения от нормальной нагрузки / Г. И. Епифанов // В сб.: Сухое трение. Рига: Изд-во АН ЛатвССР, 1961. — С. 29–40.
196. Ringlein J. Understanding and illustrating the atomic origins of friction / J. Ringlein, M. O. Robbins // American Journal of Physics. — 2004. — Vol. 72, № 7. — P. 884–891.
197. Tshiprut Z. Tuning diffusion and friction in microscopic contacts by mechanical excitations / Z. Tshiprut, A. E. Filippov, M. Urbakh // Physical Review Letters. — 2005. — Vol. 95, № 1. — P. 016101 (4 pp.).
198. Ландау Л. Д. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода / Л. Д. Ландау, И. М. Халатников // Доклады Академии наук СССР. — 1954. — Т. 96, № 3–4. — С. 469–472.
199. Hohenberg P. C. Theory of dynamic critical phenomena / P. C. Hohenberg, В. I. Halperin // Reviews of Modern Physics. — 1977. — Vol. 49, № 3. — P. 435–479.
200. Haken H. Information and self-organization: A macroscopic approach to complex systems, 3-nd ed. / H. Haken. — Berlin, New York : Springer-Verlag, 2006. — 270 p.
201. Evstigneev M. Langevin equation for a system nonlinearly coupled to a heat bath / M. Evstigneev, P. Reiman // Physical Review B. — 2010. — Vol. 82, № 22. — P. 224303 (11 pp.).
202. Box G. E. P. A note on the generation of random normal deviates / G. E. P. Box, M. E. Muller // The Annals of Mathematical Statistics. — 1958. — Vol. 29, № 2. — P. 610–611.
203. Voisin C. Long term friction: from stick-slip to stable sliding / C. Voisin, F. Renard, J. -R. Grasso // Geophysics Research Letters. — 2007. — Vol. 34, № 13. — P. L13301 (5 pp.).

204. Yang C. -R. Study on dynamic friction characteristics in reciprocating friction drive system / C. -R. Yang, R. -T. Lee, Y. -C. Chiou // Tribology International. – 1997. – Vol. 30, № 10. – P. 719–731.
205. Yang C.-R. Tribological behavior of reciprocating friction drive system under lubricated contact / C. -R. Yang, Y. -C. Chiou, R. -T. Lee // Tribology International. – 1999. – Vol. 32, № 8. – P. 443–453.
206. Lee R. -T. A procedure for evaluating the positioning accuracy of reciprocating friction drive systems / R. -T. Lee, C. -R. Yang, Y. -C. Chiou // Tribology International. – 1996. – Vol. 29, № 5. – P. 395–404.
207. Olemskoi A. I. Axiomatic theory of self-organizing system / A. I. Olemskoi // Physica A. – 2002. – Vol. 310, № 1–2. – P. 223–233.
208. Bhushan B. Nanotribology: friction, wear and lubrication at the atomic scale / B. Bhushan, J. N. Israelachvili, U. Landman // Nature. – 1995. – Vol. 374, № 6523. – P. 607–616.
209. Sivebaek I. M. Effective viscosity of confined hydrocarbons / I. M. Sivebaek, V. N. Samoilov, B. N. J. Persson // Physical Review Letters. – 2012. – Vol. 108, № 3. – P. 036102 (4 pp.).
210. Filippov A. E. Torque and twist against superlubricity / [A. E. Filippov, M. Dienwiebel, J. W. M. Frenken et al.] // Physical Review Letters. – 2008. – Vol. 100, № 4. – P. 046102 (4 pp.).
211. Hirano M. Superlubricity: a state of vanishing friction / M. Hirano // Wear. – 2003. – Vol. 254, № 10. – P. 932–940.
212. Macroscale superlubricity enabled by graphene nanoscroll formation / [D. Berman, S. A. Deshmukh, S. K. R. S. Sankaranarayanan et al.] // Science. – 2015. – Vol. 348, № 6239. – P. 1118–1122.
213. Superlubricity in centimetres-long double-walled carbon nanotubes under ambient conditions / [R. Zhang, Z. Ning, Y. Zhang et al.] // Nature Nanotechnology. – 2013. – Vol. 8, № 12. – P. 912–916.
214. Кластерные и наноструктурные материалы, Т. 3 / [Шпак А. П., Черемской П. Г., Куницкий Ю. А., Соболев О. В.]. – К. : И.Д. Академперіодика,

2005. – 516 с.

215. Atomic-scale control of friction by actuation of nanometer-sized contacts / [A. Socoliuc, E. Gnecco, S. Maier et al.] // *Science*. – 2006. – Vol. 313. – P. 207–210.
216. Ляшенко Я. А. Гистерезисный характер плавления граничного слоя смазки между атомарно гладкими твердыми поверхностями / Я. А. Ляшенко // *Материалы VII Международной научно-инновационной молодежной конференции [”Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент“], (Тамбов, Россия, 28-30 октября 2015 г.). – Тамбов, 2015. – С. 365-367.*
217. Бронштейн И. Н. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов / И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев. – Москва : Наука, 1981. – 723 с.
218. Заскока А. М. Фазові переходи в ультратонких твердоподібних плівках мастила при межовому терті: дис. ... канд. фіз.-мат. наук: 01.04.07 / Заскока Антон Миколайович. – Суми, 2015. – 126 с.
219. Berman A. Amontons' law at the molecular level / A. Berman, C. Drummond, J. Israelachvili // *Tribology Letters*. – 1998. – Vol. 4, № 2. – P. 95–101.
220. On the origin of Amonton's friction law / [B. N. J. Persson, I. M. Sivebaek, V. N. Samoilov et al.] // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2008. – Vol. 20, № 39. – P. 395006 (11 pp).
221. Frictional forces and Amontons' law: from the molecular to the macroscopic scale // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 2004. – Vol. 108, № 11. – P. 3410–3425.
222. On the role of scales in contact mechanics and friction between elastomers and randomly rough self-affine surfaces / [V. L. Popov, A. Dimaki, S. Psakhie, M. Popov] // *Scientific Reports*. – 2015. – Vol. 5. – P. 11139 (7 pp.).
223. Buldum A. Atomic-scale study of dry sliding friction / A. Buldum, S. Ciraci // *Physical Review B*. – 1997. – Vol. 55, № 4. – P. 2606–2611.
224. Structures of binary metallic nanoparticles produced by electrical explosion of two wires from immiscible elements / [M. I. Lerner, A. V. Pervikov,

- E. A. Glazkova et al.]// Powder Technology. – 2016. – Vol. 288. – P. 371–378.
225. On adatomic-configuration-mediated correlation between electrotransport and electrochemical properties of graphene / [T. M. Radchenko, V. A. Tatarenko, I. Yu. Sagaljanov et al.]// Carbon. – 2016. – Vol. 101. – P. 37–48.
226. Persson B. N. J. Sliding friction / B. N. J. Persson // Surface Science Reports. – 1999. – Vol. 33, № 3. – P. 83–119.
227. Berman A. D. Origin and characterization of different stick–slip friction mechanisms / A. D. Berman, W. A. Ducker, J. N. Israelachvili // Langmuir. – 1996. – Vol. 12, № 19. – P. 4559–4563.
228. Khomenko A. V. Temperature dependence effect of viscosity on ultrathin lubricant film melting / A. V. Khomenko, I. A. Lyashenko // Condensed Matter Physics. – 2006. – Vol. 9, № 4(48). – P. 695–702.
229. Braun O M. Role of lubricant molecular shape in microscopic friction / O. M. Braun, N. Manini, E. Tosatti // Physical Review B. – 2008. – Vol. 78, № 19. – P. 195402 (10 pp.).
230. Friction and wear protection performance of synthetic siloxane / [T. J. Zolper, A. Seyam, Z. Li et al.]// Tribology Letters. – 2013. – Vol. 51, № 3. – P. 365–376.
231. Lubrication properties of polyalphaolefin and polysiloxane lubricants: molecular structure – tribology relationships / [T. Zolper, Z. Li, C. Chen et al.]// Tribology Letters. – 2012. – Vol. 48, № 3. – P. 355–365.
232. Energy efficient siloxane lubricants utilizing temporary shear-thinning / [T. J. Zolper, A. M. Seyam, C. Chen] // Tribology Letters. – 2013. – Vol. 49, № 3. – P. 525–538.
233. Толстой Д. М. Теория трения и износа. Сб. научн. трудов. / Д. М. Толстой, Р. Л. Каплан. – Москва : Наука, 1965. – С. 44–49.
234. Braun O. M. Stick-slip vs. smooth sliding in the multicontact interface / O. M. Braun // Europhysics Letters. – 2015. – Vol. 109, № 4. – P. 48004 (6 pp.).
235. Teidelt E. Influence of ultrasonic oscillation on static and sliding friction / E. Teidelt, J. Starcevic, V. L. Popov // Tribology Letters. – 2012. – Vol. 48,

- № 1. – P. 51–62.
236. He G. Simulations of the static friction due to adsorbed molecules / G. He, M. O. Robbins // *Physical Review B*. – 2001. – Vol. 64, № 3. – P. 035413 (13 pp.).
237. Yamada S. Nanotribology of ethers: effects of molecular asymmetry and fluoroalkyl chains / S. Yamada // *Langmuir*. – 2005. – Vol. 21, № 19. – P. 8724–8732.
238. Yamada S. Friction and adhesion hysteresis of fluorocarbon surfactant monolayer-coated surfaces measured with the surface forces apparatus / S. Yamada, J. Israelachvili // *The Journal of Physical Chemistry B*. – 1998. – Vol. 102, № 1. – P. 234–244.
239. Capozza R. Probing and tuning frictional aging at the nanoscale / R. Capozza, I. Barel, M. Urbakh // *Scientific Reports*. – 2013. – Vol. 3. – P. 1896 (6 pp.)
240. Filippov A. E. Origin of friction anisotropy on a quasicrystal surface / A. E. Filippov, A. Vanossi, M. Urbakh // *Physical Review Letters*. – 2010. – Vol. 104, № 7. – P. 149901.
241. Эффект памяти формы и сверхэластичность сплавов никелида титана, имплантированных высокими дозами ионов / [А. Д. Погребняк, С. Н. Братушка, В. М. Береснев, N. Levintant-Zayonts] // *Успехи химии*. – 2013. – Т. 82, № 12. – С. 1135–1159.
242. Rate and state dependent friction laws and the prediction of earthquakes: What can we learn from laboratory models? / [V. L. Popov, B. Grzempa, J. Starcevic, M. Popov] // *Tectonophysics*. – 2012. – Vol. 532–535. – P. 291–300.
243. Brace W. F. Stick-slip as a mechanism for earthquakes / W. F. Brace, J. D. Byerlee // *Science*. – 1966. – Vol. 153, № 3739. – P. 990–992.
244. Experimental verification of the mechanisms causing stick-slip motion originating from relative deceleration / [P. De Baets, J. Degrieck, F. Van De Velde, A. P. Van Peteghem] // *Wear*. – 2000. – Vol. 243, № 1–2. – P. 48–59.
245. Identifying the mechanisms of polymer friction through molecular dynamics

- simulation / [L. Dai, M. Minn, N. Satyanarayana et al.] // *Langmuir*. – 2011. – Vol. 27, № 24. – P. 14861–14867.
246. Zheng X. Molecular dynamics simulation of boundary lubricated contacts: thesis ... doctor of philosophy / Zheng Xuan. – Wollongong, Australia, 2014. – 218 p.
247. Aranson I. S. Stick-slip friction and nucleation dynamics of ultrathin liquid films // I. S. Aranson, L. S. Tsimring, V. M. Vinokur // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 65, № 12. – P. 125402 (7 pp.).
248. The nonlinear nature of friction / [M. Urbakh, J. Klafter, D. Gourdon, J. Israelachvili] // *Nature*. – 2004. – Vol. 430, № 6999. – P. 525–528.
249. Харченко Д. О. Методи описання і моделювання стохастичних систем / Д. О. Харченко. – Суми : Вид-во СумДУ, 2007. – 206 с.
250. Temam R. Navier-stokes equations, theory and numerical analysis / R. Temam. – Amsterdam : North-Holland Publishing Co., 1977. – 504 p.
251. Monk P. Finite element methods for Maxwell's equations / P. Monk. – Oxford UK : Oxford University Press, 2003. – 464 p.
252. Eddy current effects in the magnetization dynamics of ferromagnetic metal nanoparticles / [S. I. Denisov, T. V. Lyuty, B. O. Pedchenko, H. V. Babych] // *Journal of Applied Physics*. – 2014. – Vol. 116, № 4. – P. 043911 (6 pp.).
253. Crank J. The mathematics of diffusion / J. Crank. – Oxford : Clarendon Press, 1956. – 347 p.
254. Zuev L. B. A self-excited wave model of plastic deformation in solids / L. B. Zuev, V. I. Danilov // *Philosophical Magazine A*. – 1999. – Vol. 79, № 1. – P. 43–57.
255. Persson B. N. J. Relation between interfacial separation and load: A general theory of contact mechanics / B. N. J. Persson // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 99, № 12. – P. 125502 (4 pp.).
256. Campañá C. Elastic contact between self-affine surfaces: comparison of numerical stress and contact correlation functions with analytic predictions / C. Campañá, M. H. Müser, M. O. Robbins // *Journal of Physics: Condensed*

- Matter. – 2008. – Vol. 20, № 35. – P. 354013 (12 pp.).
257. Geike T. Mapping of three-dimensional contact problems into one dimension / T. Geike, V. L. Popov // *Physical Review E*. – 2007. – Vol. 76, № 3. – P. 036710 (5 pp.).
258. Persson B. N. J. On the fractal dimension of rough surfaces / B. N. J. Persson // *Tribology Letters*. – 2014. – Vol. 54, № 1. – P. 99–106.
259. Структура и свойства твёрдых и сверхтвёрдых нанокompозитных покрытий / [А. Д. Погребняк, А. П. Шпак, Н. А. Азаренков, В. М. Береснев] // *Успехи физических наук*. – 2009. – Т. 179, № 1. – P. 35–64.
260. Gardiner C. W. Handbook of stochastic methods: for physics, chemistry and the natural sciences / C. W. Gardiner. – Berlin : Springer, 1983. – 443 p.
261. Denisov S. I. Statistical properties of a class of nonlinear systems driven by colored multiplicative Gaussian noise / S. I. Denisov, W. Horsthemke // *Physical Review E*. – 2002. – Vol. 65, № 3. – P. 031105 (13 pp.).
262. Acoustic emission and microslip precursors to stick-slip failure in sheared granular material / [P. A. Johnson, B. Ferdowsi, B. M. Kaprothet et al.] // *Geophysical Research Letters*. – 2015. – Vol. 40, № 21. – P. 5627–5631.
263. Tartaglino U. Role of surface roughness in superlubricity / U. Tartaglino, V. N. Samoilov, B. N. J. Persson // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2006. – Vol. 18, № 17. – P. 4143–4160.
264. Persson B. N. J. Contact mechanics for randomly rough surfaces / B. N. J. Persson // *Surface Science Reports*. – 2006. – Vol. 61, № 4. – P. 201–227.
265. Ruths M. Boundary friction of aromatic self-assembled monolayers: comparison of systems with one or both sliding surfaces covered with a thiol monolayer / M. Ruths // *Langmuir*. – 2003. – Vol. 19, № 17. – P. 6788–6795.
266. Jeong S. -H. Friction and wear characteristics due to stick-slip under fretting conditions / S. -H. Jeong, S. -J. Yong, Y. -Z. Lee // *Tribology Transactions*. – 2007. – Vol. 50, № 4. – P. 564–572.

267. Atomistic simulations of the sliding friction of graphene flakes / [F. Bonelli, N. Manini, E. Cadelano, L. Colombo] // *The European Physical Journal B*. – 2009. – Vol. 70, № 4. – P. 449–459.
268. Bayart E. Slippery but tough – the rapid fracture of lubricated frictional interfaces / E. Bayart, I. Svetlitzky, J. Fineberg // *Physical Review Letters*. – 2016. – Vol. 116, № 19. – P. 194301.
269. Kuznetsov V. P. Elastic smoothing of surfaces with holes on turning and milling centers / Kuznetsov V. P., Il'ichev S. A., Gorgots V. G. // *Russian Engineering Research*. – 2009. – Vol. 29, № 11. – P. 1148–1152.
270. Кузнецов В. П. Моделирование нелинейной динамики технологических процессов механической обработки / В. П. Кузнецов, В. Г. Горгоц. – Курган : Курганский государственный университет, 2013. – 64 с.
271. Сандерс Д. Технология CUDA в примерах. Введение в программирование графических процессоров: пер. с англ. Слинкина А.А., научный редактор Боресков А. В. / Д. Сандерс, Э. Кэндрот. – Москва : ДМК Пресс, 2011. – 232 с.
272. Смирнов В. И. Вариационное исчисление / В. И. Смирнов, В. И. Крылов, Л. В. Канторович. – Ленинград : Кубуч, 1933. – 204 с.
273. Чупров И. Ф. Уравнения параболического типа и некоторые методы их решения / И. Ф. Чупров, Е. А. Канева. – Ухта : УГТУ, 2012. – 103 с.
274. Israelachvili J. N. Techniques for direct measurements of forces between surfaces in liquids at the atomic scale / J. N. Israelachvili // *Chemtracts: Analytical and Physical Chemistry*. – 1989. – Vol. 1, № 1. – P. 1–12.
275. Elastic contact mechanics: percolation of the contact area and fluid squeeze-out / [B. N. J. Persson, N. Prodanov, B. A. Krick et al.] // *European Physical Journal E*. – 2012. – Vol. 35, № 1. – P. 5–21.
276. Campañá C. Transverse and normal interfacial stiffness of solids with randomly rough surfaces / C. Campañá, B. N. J. Persson, M. H. Müser // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2001. – Vol. 23, № 8. – P. 085001 (9 pp.).
277. Maximum micro-slip in tangential contact of randomly rough self-affine surfaces / [B. Grzempa, R. Pohrt, E. Teidelt, V. L. Popov] // *Wear*. – 2014. –

- Vol. 309, № 1–2. – P. 256–258.
278. Persson B. N. J. On the origin of the transition from slip to stick / B. N. J. Persson, V. L. Popov // *Solid State Communications*. – 2000. – Vol. 114, № 5. – P. 261–266.
279. Borysiuk V. N. Molecular dynamic study of the mechanical properties of two-dimensional titanium carbides $Ti_{n+1}C_n$ (MXenes) / V. N. Borysiuk, V. N. Mochalin, Y. Gogotsi // *Nanotechnology*. – Vol. 26, № 26. – P. 265705 (10 pp.).
280. Кузнецов В. П. Теоретическое обоснование и реализация наноструктурирующего выглаживания прецезионных деталей из конструкционных сталей: дис. ... докт. техн. наук: 05.02.07 / Кузнецов Виктор Павлович. – Томск, 2013. – 341 с.
281. Метлов Л. С. Структурная перестройка и динамические эффекты в твердых телах: дис. ... докт. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Метлов Леонид Семенович. – Донецк, 2010. – 315 с.
282. Kuznetsov V. P. Elastic smoothing of surfaces with holes on turning and milling centers / V. P. Kuznetsov, S. A. Il'ichev, V. G. Gorgots // *Russian Engineering Research*. – Vol. 29, № 11. – P. 1148–1152.
283. Fajardo O. Y. Friction through reversible jumps of surface atoms / O. Y. Fajardo, I. Barel, M. Urbakh // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2014. – Vol. 26, № 31. – P. 315005 (7 pp.).
284. Strain rate dependent mechanical properties in single crystal nickel nanowires / [C. Peng, Y. Zhong, Y. Lu et al.] // *Applied Physics Letters*. – 2013. – Vol. 102, № 8. – P. 083102 (5 pp.).
285. Balmer T. E. Resolving structural and dynamical properties in nano-confined fluids: thesis ... doctor of sciences / Tobias E. Balmer. – Zurich, Germany, 2007. – 184 p.
286. Качанов Л. М. Основы теории пластичности / Л. М. Качанов. – Москва : Наука, 1969. – 420 с.
287. Ландау Л. Д. Теоретическая физика: Учебное пособие: в 10 т. / Л. Д. Ландау,

- Е. М. Лифшиц. — Москва : УРСС, 2007. — Т. 7 : Теория упругости. Изд. 6. — 2007. — 264 с.
288. Sivebaek I. M. Velocity dependence of friction of confined hydrocarbons / I. M. Sivebaek, V. N. Samoilov, B. N. J. Persson // *Langmuir*. — 2010. — Vol. 26, № 11. — P. 8721–8728.
289. Aichele M. Kinetic friction and atomistic instabilities in boundary-lubricated systems / M. Aichele, M. H. Müser // *Physical Review E*. — 2003. — Vol. 68, № 1. — P. 016125 (14 pp.).
290. Smith E. D. Friction on adsorbed monolayers / E. D. Smith, M. O. Robbins, M. Cieplak // *Physical Review B*. — 1996. — Vol. 54, № 11. — P. 8252–8260.
291. Klein J. Simple liquids confined to molecularly thin layers. I. Confinement-induced liquid-to-solid phase transitions / J. Klein, E. Kumacheva // *The Journal of Chemical Physics*. — 1998. — Vol. 108, № 16. — P. 6996–7009.
292. Дедков Г. В. Нанотрибология: экспериментальные факты и теоретические модели / Г. В. Дедков // *Успехи физических наук*. — 2000. — Т. 170, № 6. — С. 585–618.
293. On the dependency of friction on load: Theory and experiment / [O. M. Braun, B. Steenwyk, A. Warhadpande, B. N. J. Persson] // *Europhysics Letters*. — 2016. — Vol. 113, № 5. — P. 56002 (5 pp.).
294. Gnecco E. Fundamentals of friction and wear on the nanoscale / E. Gnecco, E. Meyer. — Berlin : Springer-Verlag, 2007. — 714 p.
295. Boundary lubrication under water / [W. H. Briscoe, S. Titmuss, F. Tiberg et al.] // *Nature*. — 2006. — Vol. 444, № 7116. — P. 191–194.
296. Климонтович Ю. Л. Проблемы статистической теории открытых систем: критерии относительной степени упорядоченности состояний в процессах самоорганизации / Ю. Л. Климонтович // *Успехи физических наук*. — 1989. — Т. 158, № 1. — С. 59–91.
297. Стефанович Л. И. Корреляционный анализ динамики распада и упорядочения твердотельных систем, далеких от термодинамического равновесия: дис. . . . докт. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Стефанович Леонид Ильич. — Донецк,

1999. – 316 с.
298. Lei Y. Stick-slip friction and energy dissipation in boundary lubrication / Y. Lei, Y. Leng // *Physical Review Letters*. – 2011. – Vol. 107, № 14. – P. 147801 (5 pp.).
299. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения / Л. С. Метлов. – Донецк : Ноулидж, 2014. – 177 с.
300. Nonlinear irreversible thermodynamics of single-molecule experiments / [I. Santamaría-Holek, N. J. López-Alamilla, M. Hidalgo-Soria, A. Pérez-Madrid] // *Physical Review E*. – 2015. – Vol. 91, № 6. – P. 062714.
301. Hidalgo-Soria M. Effect of elastic colored noise in the hopping dynamics of single molecules in stretching experiments / M. Hidalgo-Soria, A. Pérez-Madrid, I. Santamaría-Holek // *Physical Review E*. – 2015. – Vol. 92, № 6. – P. 062708.
302. Метлов Л. С. Термодинамика интенсивных пластических деформаций / Л. С. Метлов // *Металлофизика и новейшие технологии*. – 2007. – Т. 29, № 3. – С. 335–345.
303. Метлов Л. С. Термодинамика неравновесных процессов в приложении к интенсивным пластическим деформациям / Л. С. Метлов // *Известия РАН. Серия физическая*. – 2008. – Т. 72, № 9. – С. 1353–1357.
304. Metlov L. S. Formation of the internal structure of solids under severe load / L. S. Metlov // *Physical Review E*. – 2010. – Vol. 81, № 5. – P. 051121 (9 pp.).
305. Metlov L. S. Nonequilibrium evolution thermodynamics of vacancies / L. S. Metlov // *Physical Review Letters*. – 2011. – Vol. 106, № 16. – P. 165506 (4 pp.).
306. Olemskoi A. I. Self-organized criticality within fractional Lorenz scheme / A. I. Olemskoi, A. V. Khomenko, D. O. Kharchenko // *Physica A*. – 2003. – Vol. 323. – P. 263–293.
307. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика. Теория и эксперимент / Л. С. Метлов // *Физика и техника высоких давлений*. – 2008. – Т. 18, № 3. – С. 53–61.

308. Robbins M. O. Computer simulations of friction, lubrication and wear in modern tribology. Handbook / M. O. Robbins, M. H. Müser. Edited by B. Bhushan. – Boca Raton : CRC Press, 2001. – P. 717–765.
309. Influence of cyclohexane vapor on stick-slip friction between mica surfaces / [S. Ohnishi, D. Kaneko, J. P. Gong et al.] // Langmuir. – 2007. – Vol. 23, № 13. – P. 7032–7038.
310. Yamada S. Dynamic transitions in molecularly thin liquid films under frictional sliding / S. Yamada // Langmuir. – 2008. – Vol. 24, № 4. – P. 1469–1475.
311. Кайбышев О. А. Сверхпластичность промышленных сплавов / О. А. Кайбышев. – Москва : Металлургия, 1984. – 264 с.
312. Чувильдеев В. Н. Неравновесные границы зерен в металлах. Теория и приложения / В. Н. Чувильдеев. – Москва : Физматлит, 2004. – 304 с.
313. Кайбышев О. А. К теории сверхпластичности / О. А. Кайбышев, А. И. Пшентчнюк // Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. – 2000. – № 1. – С. 53–60.
314. Перевезенцев В. Н. Модель локального плавления границ зерен, содержащих сегрегации примесных атомов / В. Н. Перевезенцев, Ю. В. Свирина, А. Ю. Угольников // Журнал технической физики. – 2002. – Т. 72, № 4. – С. 11–14.
315. Рудаев Я. И. О кинетических уравнениях модели динамической сверхпластичности / Я. И. Рудаев, Д. А. Китаева // Вестник Самарского государственного университета. Серия Естественная. – 2005. – № 3 (37). – С. 72–78.
316. Глейтер Г. Большеугловые границы зерен / Г. Глейтер, Б. Чалмерс. – Москва : Мир, 1975. – 375 с.

Приложение А

Для изотропного тела справедливо равенство [287]:

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{ii} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}. \quad (\text{A.1})$$

Выбираем главные оси деформации в качестве координатных осей, тогда тензор деформаций ε_{ij} имеет только диагональные компоненты. Рассмотрим плоское деформационное состояние смазки, в котором $\varepsilon_{22} = 0$. Диагональные компоненты тензора напряжений в такой системе координат принимают вид:

$$\sigma_1 = \lambda (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33}) + 2\mu \varepsilon_{11}, \quad (\text{A.2})$$

$$\sigma_2 = \lambda (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33}), \quad (\text{A.3})$$

$$\sigma_3 = \lambda (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33}) + 2\mu \varepsilon_{33}. \quad (\text{A.4})$$

Вдоль границы смазки действует касательное напряжение [286]

$$\tau_2 = \frac{\sigma_3 - \sigma_1}{2} = \mu (\varepsilon_{33} - \varepsilon_{11}), \quad (\text{A.5})$$

а нормальное к границе смазки напряжение равно [286]

$$n_2 = \frac{\sigma_3 + \sigma_1}{2} = (\lambda + \mu) (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33}), \quad (\text{A.6})$$

Тогда из (A.5), (A.6) имеем

$$\varepsilon_{11} = \frac{1}{2} \left(\frac{n_2}{\lambda + \mu} - \frac{\tau_2}{\mu} \right), \quad (\text{A.7})$$

$$\varepsilon_{33} = \frac{1}{2} \left(\frac{n_2}{\lambda + \mu} + \frac{\tau_2}{\mu} \right). \quad (\text{A.8})$$

Соответственно, первые два инварианта тензора деформации (5.13), (5.14) определяются как

$$\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = \frac{n_2}{\lambda + \mu}, \quad (\text{A.9})$$

$$(\varepsilon_{ij})^2 = (\varepsilon_{11})^2 + (\varepsilon_{22})^2 + (\varepsilon_{33})^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau_2}{\mu} \right)^2 + (\varepsilon_{ii})^2 \right]. \quad (\text{A.10})$$