

УДК 621.891

КП

№ 0115U004662

Инв. №

Министерство образования и науки Украины
Сумский государственный университет (СумГУ)
40007, г. Сумы, ул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08,
факс (0542) 33-40-49

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе

д. ф.-м. н., профессор

_____ А.Н. Черноус

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

"Моделирование пространственно неоднородных явлений граничного трения в кинетическом и статическом режимах"

(заключительный)

Начальник НИЧ

к.ф.-м.н., с.н.с.

Руководитель НИР

к.ф.-м.н., доцент

Д.И. Курбатов

Я.А. Ляшенко

2015

Рукопись закончена 18 декабря 2015 г.

Результаты этой работы рассмотрены научным советом СумГУ,

протокол от 2015.12.22 № 4

СПИСОК АВТОРОВ

Доцент к.ф.-м.н. (руководитель)	(2015.12.18)	Я. А. Ляшенко (разд. 1, 2)
Ассистент	(2015.12.18)	А. Н. Заскока (разд. 3)
Профессор д.ф.-м.н.	(2015.12.18)	А. В. Хоменко (разд. 1)
Старший преподаватель к.ф.-м.н.	(2015.12.18)	В. Н. Борысюк (разд. 3)
Ассистент к.ф.-м.н.	(2015.12.18)	Н. Н. Манько (разд. 3)
Аспирант	(2015.12.18)	Д. С. Трощенко (разд. 2)

РЕФЕРАТ

Отчет по НИР: 58 с., 16 рис., 33 источников.

Цель работы — построение неравновесной термодинамической модели плавления ультратонкой пленки смазки и исследование поведения трибологической системы на ее основе.

Объектом исследования является ультратонкая пленка смазки зажатая между двумя неровными твердыми поверхностями.

Методы исследования: методы неравновесной эволюционной термодинамики, теория фазовых переходов и теории упругости, методы вычислительной математики.

В рамках модели фазовых переходов первого рода на примере простого механического аналога трибологической системы, обладающей упругостью, изучаются процессы трения двух неровных поверхностей, работающих в граничном режиме при наличии смазочного слоя между ними. Рассмотрен прерывистый (stick-slip) режим движения, возникающий за счет периодических фазовых переходов между кинетическими режимами трения. Показано, что при наличии неровностей поверхностей в процессе движения в плоскости трения реализуется изменяющаяся со временем доменная структура, характеризующаяся пространственным распределением значений параметра порядка. В рамках модели фазовых переходов первого рода, с учетом пространственной неоднородности, изучаются процессы граничного трения двух атомарно-гладких твердых поверхностей, при наличии ультратонкого слоя смазочного материала между ними. Показано, что в процессе движения смазка стремится принять однородную по плоскости скольжения структуру, что приводит к периодичности зависимостей основных параметров от времени в прерывистом режиме.

ТРЕНИЕ, УПРУГИЕ И ВЯЗКИЕ НАПРЯЖЕНИЕ, НЕРОВНАЯ ПОВЕРХНОСТЬ, ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД, ПРОСТРАНСТВЕННАЯ НЕОДНОРОДНОСТЬ.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	6
1 ПЛАВЛЕНИЕ ГРАНИЧНОЙ СМАЗКИ МЕЖДУ ДВУМЯ ЖЕСТКИМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ С НАНОРАЗМЕТРНЫМИ НЕРОВНОСТЯМИ	9
1.1 Свободная энергия и фазовая диаграмма	9
1.2 Кинетика плавления смазки	12
2 УЧЕТ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ	25
2.1 Свободная энергия	25
2.2 Разностная схема, начальные и граничные условия	26
2.3 Трибологическая система	31
2.4 Результаты моделирования и обсуждение	32
3 ВЛИЯНИЕ УНИВЕРСАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ УЛЬТРАТОНКОЙ ПЛЕНКИ СМАЗКИ НА РЕЖИМ ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ	37
3.1 Основные уравнения	37
3.2 Учет температурной зависимости вязкости	41
3.3 Скольжение при длительной остановке внешнего привода	46
3.4 Зависимости силы трения для молекул смазки различной длины ...	49

ОБЩИЕ ВЫВОДЫ	53
ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК	55

ВВЕДЕНИЕ

Изучение процессов граничного трения привлекает внимание исследователей не первое десятилетие. Более века назад, в далеком 1902 году немецкий ученый Рихард Герман Штрибек экспериментально получил зависимость коэффициента трения в подшипнике от скорости вращения при наличии смазки. Впоследствии зависимость получила название диаграммы Герси-Штрибека. При малой толщине смазки в начале движения подшипника на диаграмме реализуется переходной режим граничного трения. Граничный режим, согласно диаграмме Герси-Штрибека, характеризуется большим коэффициентом трения, и, как следствие, повышенной диссипацией механической энергии, приводящей к нагреву трущихся деталей, который может привести к их разрушению. В связи с этим исследование режима граничного трения имеет высокое прикладное значение. С появлением современного инструментария стало возможным прямое наблюдение за сложнейшими процессами, происходящими в области контакта [1, 2]. Причем современные эксперименты [3–5] подтверждают и уточняют многие интуитивные выводы, сделанные как советскими (Ахматов, Епифанов, Дерягин и др.), так и зарубежными (Гарди, Бир, Боуден и др.) учеными прошлого столетия.

В режиме граничного трения часто нарушается известный закон Амонтона. Например, в экспериментах Гарди по трению двух плоских поверхностей, разделенных граничным слоем ароматических соединений [6], 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 повыше-

нием давления слой смазки становится тоньше, что и приводит к изменению коэффициента трения. Таким образом, Гарди вводит зависимость коэффициента трения от толщины смазки. В предлагаемой работе как раз рассматривается ситуация, когда толщина смазочного слоя оказывает критическое влияние на режим трения. В своих работах Гарди пишет “состояние смазки нельзя назвать ни жидким, ни твердым”. В современной литературе вводятся понятия жидкоподобного и твердоподобного состояний, отличающихся от равновесных термодинамических фаз, поскольку микрорельеф трущихся поверхностей оказывает существенное влияние на смазку, нарушая симметрию состояния [7, 8].

Несмотря на то, что изучение граничного режима имеет высокое прикладное и фундаментальное значение, до сих пор не существует единой теории граничного трения. Ввиду сложности процессов, протекающих при трении в зоне контакта, зачастую пользуются феноменологическими моделями [7, 9–12]. Также для описания результатов экспериментов активно применяются методы молекулярной динамики [13–15]. В частности, в работах [16, 17] предложена синергетическая модель, в которой плавление смазочного слоя происходит за счет механизмов термодинамического и сдвигового плавления. В работах Попова [7, 9] разработана термодинамическая теория граничного трения, основанная на теории фазовых переходов Ландау второго рода [18], где в качестве параметра порядка выбирается модуль сдвига смазочного материала, принимающий нулевое значение в жидкоподобной фазе. Однако, в режиме граничного трения часто наблюдаются скачкообразные фазовые превращения первого рода [8, 11, 19], приводящие к установлению прерывистого режима движения [8, 19, 20]. В связи с этим в [21, 22] проведено обобщение теории [7, 9] на случай реализации фазового перехода первого рода. В работах [21, 22] исследуется специфическая ситуация трения атомарно-гладких поверхностей, которая, однако, не является исключением, и широко

изучается экспериментально [3, 4, 8, 19]. Предлагаемая работа является продолжением [21, 22], и предпринята с целью теоретического изучения особенностей режима граничной смазки при взаимном трении поверхностей, обладающих наноразмерными неровностями. Поскольку в технических приложениях поверхности трения практически всегда обладают неровностями и неоднородностями, предлагаемый подход позволяет расширить результаты предыдущих работ на более широкий класс реальных трибологических систем.

1 ПЛАВЛЕНИЕ ГРАНИЧНОЙ СМАЗКИ МЕЖДУ ДВУМЯ ЖЕСТКИМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ С НАНОРАЗМЕТРНЫМИ НЕРОВНОСТЯМИ

1.1 Свободная энергия и фазовая диаграмма

В однородном случае выражение для плотности свободной энергии смазочного слоя между двумя твердыми поверхностями может быть представлено в виде [7, 9, 21, 22]:

$$f = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4, \quad (1.1)$$

где T — температура смазки, T_c — критическая температура, ε_{el} — сдвиговая компонента упругой деформации, α, a, b, c — положительные постоянные. Параметр порядка φ представляет амплитуду периодической части микроскопической функции плотности среды [7, 9]. Таким образом, жидкоподобная фаза смазки характеризуется стационарным значением $\varphi_0 = 0$, тогда как в твердоподобной фазе устанавливается ненулевое значение $\varphi_0 > 0$. Разложение (1.1), в отличие от работ [7, 9], соответствует модели фазового перехода первого рода [18, 21–23].

Поскольку параметр φ представляет собой модуляцию плотности, далее будем рассматривать диапазон $\varphi \geq 0$. Анализируя выражение (1.1), можно выделить критические температуры плавления T_{c0} и затвердевания T_c^0 смазки, причем $T_{c0} > T_c^0$ на постоянную величину, зависящую только от констант разложения [21, 22]:

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha}\varepsilon_{el}^2 + \frac{b^2}{8\alpha c}, \quad (1.2)$$

$$T_c^0 = T_c - \frac{a}{2\alpha}\varepsilon_{el}^2. \quad (1.3)$$

В диапазоне температур $T_c^0 < T < T_{c0}$ на зависимости $\varphi_0(T, \varepsilon_{el})$ реализу-

ется область гистерезиса, характерная для фазовых переходов первого рода [21, 22]. Отметим, что при плавлении параметр порядка скачкообразно изменяется от стационарного значения $\varphi_0 = 0.5bc^{-1}$ до нуля, в то время как при затвердевании стационарное значение φ растет от нуля до величины $\varphi_0 = bc^{-1}$ [21, 22].

При трении поверхностей в смазочном слое появляются упругие напряжения σ_{el} , определяющиеся как производная от свободной энергии f (1.1) по деформации ε_{el} :

$$\sigma_{el} = \mu\varepsilon_{el}, \quad (1.4)$$

$$\mu = a\varphi^2, \quad (1.5)$$

где модуль сдвига смазки μ сводится к квадрату параметра порядка с точностью до постоянного множителя a [7, 9, 21, 22]. Сила трения, которая оказывает сопротивление движению поверхностей, определяется согласно формуле [11, 21, 22, 24]:

$$F = \left[\sigma_{el} + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (1.6)$$

где A — площадь контакта трущихся поверхностей, h — толщина смазочного слоя, а феноменологические параметры k, γ задают тип смазочного материала [20, 25]. В частности, значение $\gamma < 0$ отвечает неньютоновской псевдопластической смазке. Второе слагаемое в скобках в выражении (1.6) представляет вязкие напряжения, существующие только при движении поверхностей с относительной скоростью $V \neq 0$. В формуле (1.6) сила трения пропорциональна площади контакта A и не зависит от нагрузки на поверхности. Это связано с тем, что рассматриваются специфические условия трения двух наноразмерных поверхностей, разделенных слоем простой неполярной смазки. Причем между поверхностями при движении поддерживается фиксированное

расстояние. В этом случае площадь реального контакта через смазку близка к площади поверхностей вне зависимости от приложенного давления, что позволяет использовать формулу (1.6). При этом такое понятие, как коэффициент трения, теряет смысл [26].

В работах [11, 21, 22, 27] показано, что при движении трущихся поверхностей с относительной скоростью V в смазочном слое возникают стационарные упругие деформации

$$\varepsilon_{el}^0 = \frac{V\tau_\varepsilon}{h}, \quad (1.7)$$

где τ_ε — максвелловское время релаксации внутренних напряжений [7]. При значении $\tau_\varepsilon \ll 1$ выражение (1.7) с достаточной точностью может быть использовано для определения текущего значения деформации ε_{el} . С учетом (1.7) из выражений для критических температур (1.2) и (1.3) легко получить аналогичные выражения для определения критических скоростей [21, 22]:

$$V_{c0} = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{4ac}}, \quad (1.8)$$

$$V_c^0 = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}. \quad (1.9)$$

На рис. 1.1 показана фазовая диаграмма состояний смазки. Она представляет зависимость скоростей V_{c0} и V_c^0 от температуры T .

Выше кривой V_{c0} смазка жидкоподобна (потенциал $f(\varphi)$ обладает единственным минимумом при $\varphi = 0$) и реализуется режим жидкостного трения SF . В области $V < V_c^0$ смазка обладает твердоподобной структурой, что соответствует единственному минимуму потенциала при $\varphi > 0$. Между кривыми на рисунке потенциал $f(\varphi)$ в положительной области φ обладает нулевым и ненулевым минимумами, которые разделены максимумом. Таким образом, в этой промежуточной области состояние смазочного материала зависит от начальных условий. Рисунок 1.1 можно также интерпретировать как зависимо-

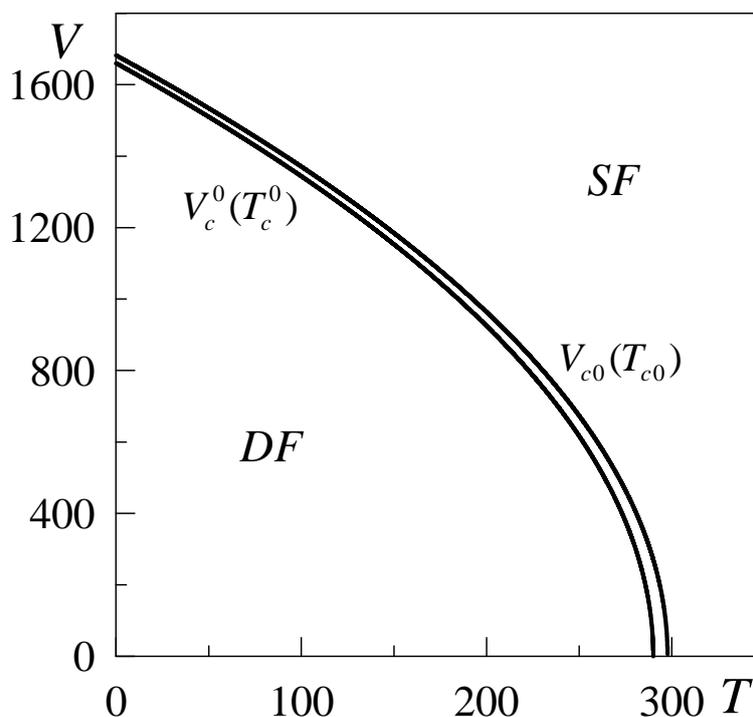


Рисунок 1.1 — Фазовая диаграмма с областями жидкоподобной (SF) и твердоподобной (DF) смазки при параметрах $\alpha = 0.95 \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}/\text{m}^3$, $T_c = 290 \text{ K}$, $a = 2 \cdot 10^{12} \text{ Pa}$, $b = 230 \text{ J}/\text{m}^3$, $c = 900 \text{ J}/\text{m}^3$, $h = 10^{-9} \text{ m}$, $\tau_\varepsilon = 10^{-8} \text{ s}$

сти критических температур T_{c0} (1.2) и T_c^0 (1.3) от скорости сдвига V .

1.2 Кинетика плавления смазки

На рис. 1.2 представлена схема типичной трибологической системы [7, 8, 19], поведение которой в рамках предлагаемой модели исследовалось нами ранее [22]. Основное отличие предлагаемой работы от предыдущих в том, что ранее исследовалось поведение атомарно-гладких трущихся поверхностей, в то время как данная работа направлена на изучение процессов граничного трения поверхностей, обладающих рельефом. Система, приведенная на рис. 1.2, состоит из пружины с жесткостью K , верхнего блока массой M , который скользит по нижней поверхности, отделенной от него слоем смазки толщиной h , которая далее в каждой точке поверхностей имеет свое конкрет-

ное значение, изменяющееся при движении. Свободный конец пружины приводится в движение с фиксированной скоростью V_0 . При скольжении блока по поверхности между ними возникает сила трения F , определяющаяся согласно формуле (1.6).

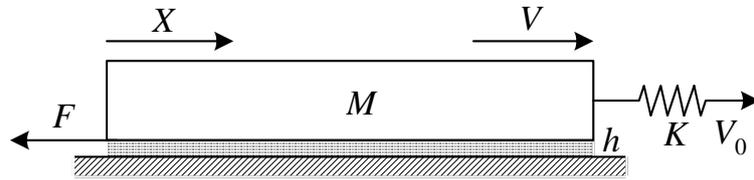


Рисунок 1.2 – Схема трибологической системы

Запишем уравнение движения верхнего блока с координатой X в виде [7, 8, 22]:

$$M\ddot{X} = K(V_0 t - X) - F, \quad (1.10)$$

где выражение в скобках представляет растяжение пружины ΔX , а t – время движения ее свободного конца. В дополнение к (1.10) необходимо записать кинетическое уравнение типа Ландау-Халатникова [22, 28]:

$$\dot{\varphi} = -\delta \frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad (1.11)$$

которое в явном виде приобретает форму

$$\dot{\varphi} = -\delta (2\alpha (T - T_c) \varphi + a\varphi \varepsilon_{el}^2 - b\varphi^2 + c\varphi^3) + \xi(t). \quad (1.12)$$

В (1.12) введен кинетический коэффициент δ , а также дополнительное стохастическое слагаемое $\xi(t)$, представляющее малые аддитивные флуктуации, учет которых необходим из-за особенностей дальнейшего численного счета [21, 22]. В простейшем случае процесс $\xi(t)$ представляется белым шумом с моментами

$$\langle \xi(t) \rangle = 0; \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2D\delta(t - t'), \quad (1.13)$$

где интенсивность стохастического источника D везде принимается

равной 10^{-25} s^{-1} .

На рис. 1.3 показан внешний вид поверхностей трения, сгенерированных с использованием широко известного холмового алгоритма (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 .

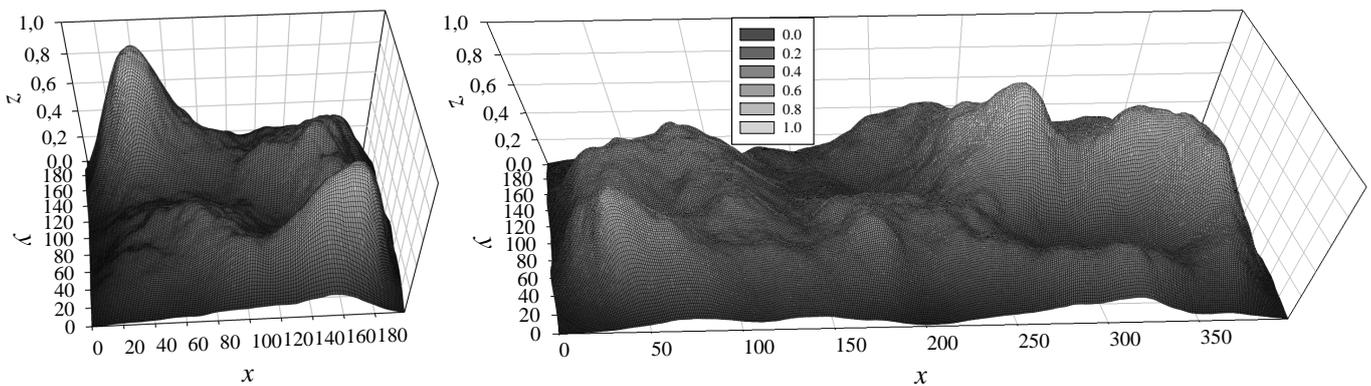


Рисунок 1.3 — Внешний вид верхней (слева) и нижней (справа) трущихся поверхностей, полученных с помощью применения холмового алгоритма (Hill Algorithm)

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

$$z = r^2 - (x - x_r)^2 - (y - y_r)^2. \quad (1.14)$$

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. Пускай процедура по-

вторяется n раз. Отметим, что величина n существенно влияет на характер полученной 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 высоты $z(x, y)$ пересчитать согласно соотношению

$$z := \frac{z - z_{min}}{z_{max} - z_{min}}, \quad (1.15)$$

где z_{min} , z_{max} — минимальное и максимальное значение z в массиве до масштабирования. На рис. 1.3 показаны поверхности, полученные таким образом. Верхняя поверхность (слева) в плоскости xy имеет 200×200 точек, нижняя (справа) — 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 того, как поверхности получены, их 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 — максималь-

ное 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 ее площадь составит $A = L^2 = 0.144 \cdot 10^{-9}$ м², а расстояние между точками по осям x и y на обеих поверхностях будет равно

$$S_{x,y} = \frac{L}{200} = 6 \cdot 10^{-8} \text{ м.} \quad (1.16)$$

В результате имеем две наноразмерные поверхности необходимых размеров с одинаковыми свойствами.

На рис. 1.4 показаны масштабированные поверхности в виде карты высот, где координаты x и y уже представляют не номер точки, как на рис. 1.3, а пространственные координаты в микрометрах, где за начало отсчета взят левый нижний угол. На рисунке на легенде оттенками серого выделены значения высот поверхностей в нанометрах. Поскольку при подготовке верхней поверхности она была инвертирована, выступы на ней теперь отвечают меньшим значениям z . Поэтому для того, чтобы на рис. 1.4 на обеих поверхностях выступам соответствовали светлые участки, значения высот на левой поверхности увеличиваются от светлого к темному, а на правой — наоборот.

Рассмотрим кинетику системы, показанной на рис. 1.2, где в роли верхней и нижней трущихся поверхностей выступают поверхности, показанные на рис. 1.4. Для этого необходимо численно решать систему дифференциальных

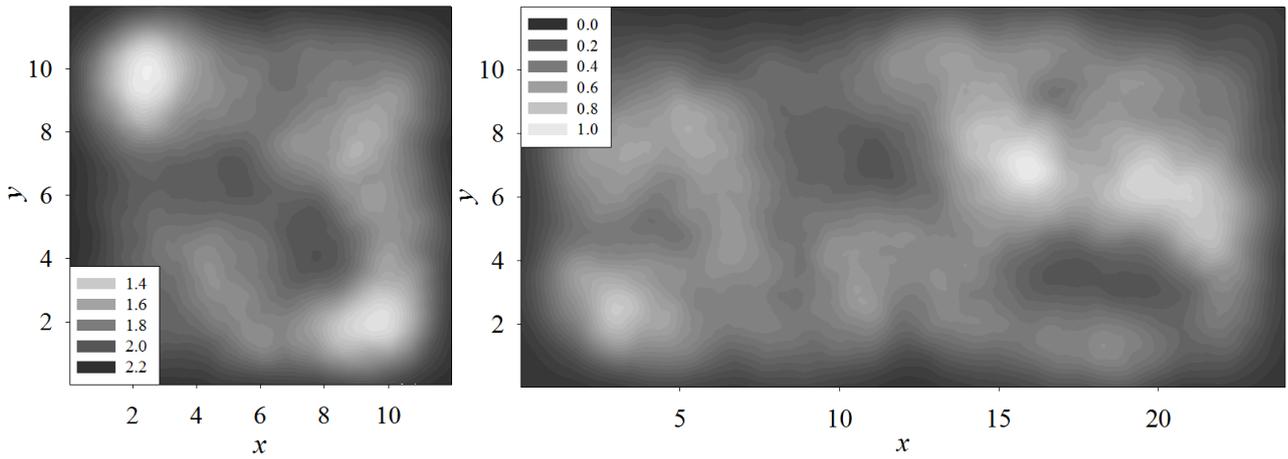


Рисунок 1.4 – Карта высот верхней (слева) и нижней (справа) трущихся поверхностей после масштабирования. Координаты x и y приведены в μm , высоты на легендах – в nm

уравнений (1.10), (1.12) с учетом определений (3.2), (1.5), (1.6), (1.7), (3.16). 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 либо окружающей среде). Отметим, что в процессе движения верхней поверхности величины $h[i][j]$ будут изменяться, поскольку эти высоты представляют собой расстояние между соответствующими точками верхней и нижней трущихся поверхностей. Для учета этого факта вводится целочисленная переменная

$$s = \text{integer} \left(\frac{X}{S_{x,y}} \right), \quad (1.17)$$

описывающая сдвиг верхней поверхности относительно нижней. Здесь X – координата верхней трущейся поверхности, в начале движения при $t = 0$ равная нулю, а $S_{x,y}$ (1.16) – расстояние между точками поверхности по оси X .

Тогда $h[i][j]$ легко определить как

$$h[i][j] = \text{top}[i][j] - \text{bottom}[i + s][j], \quad (1.18)$$

где $\text{top}[200][200]$ – массив, содержащий масштабированные высоты верхней поверхности, $\text{bottom}[400][200]$ – массив высот нижней. Из выражения (1.18) 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 (1.10) будем на каждом временном этапе для всех доменов в отдельности численно решать дифференциальное уравнение (1.12), 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 (1.6):

$$F[i][j] = \left[\sigma_{el}[i][j] + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h[i][j]} \right)^{\gamma+1} \right] \frac{L^2}{N^2}, \quad (1.19)$$

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 (1.19) действующая сила трения определяется как сумма всех элементов массива (всего $N^2 = 40000$) и это значение используется для решения кинетического уравнения (1.10). При этом находят новые значения X , V , ΔX , и процедура повторяется снова. В уравнении (1.19) скорость V не имеет индексов, поскольку верхняя поверхность является абсолютно жесткой и движется как единое целое.

Для численного интегрирования описанных уравнений используется

итерационный метод Эйлера [21, 22] с шагом по времени $\Delta t = 10^{-7}$ с. Итерационная процедура проводится до тех пор, пока значение целочисленной переменной сдвига s (1.17) 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 для вычислений указанных значений применить разработанную компанией NVIDIA в 2007 году параллельную архитектуру CUDA [29], которая используется для выполнения неграфических вычислений на универсальных графических процессорах (GPU) видеокарт компании NVIDIA. Поскольку уравнение движения (1.10) после вычисления значения полной силы трения F как суммы элементов (1.19) просчитывается на центральном процессоре (CPU), его частота также существенно влияет на время численного счета. Нами использовалась система на основе центрального процессора Intel Core 2 Quad Q9400, работающего на частоте 2.66 GHz и видеокарта Palit GeForce GTX 570 Sonic 1280MB, имеющая 480 универсальных процессоров, каждый из которых работает на частоте 1.4 GHz. При этом время выполнения программы (расчета зависимостей, приведенных на рис. 1.5) составило 5 часов 32 минуты.

Полученные в результате решения указанных уравнений зависимости показаны на рис. 1.5. При выбранной температуре T в состоянии покоя ($\varepsilon_{el} = 0$) смазка твердоподобна. В момент времени $t = 0$ свободный конец пружины начинает равномерное движение со скоростью $V_0 = 1.4 \mu\text{m/s}$. На начальном этапе переменная s , описывающая сдвиг, принимает нулевое значение, поэтому с ростом скорости V для всех доменов возрастают компоненты силы

трения (1.19). За счет роста скорости также увеличиваются значения упругих деформаций $\varepsilon_{el}[i][j]$, что приводит к росту упругих компонент напряжений $\sigma_{el}[i][j]$. Поскольку сначала скорость V существенно меньше значения V_0 , пружина растягивается, и растяжение ΔX увеличивается. С течением времени увеличивается координата X , устанавливается ненулевое значение s (1.17), и происходит пересчет $h[i][j]$. Это приводит к нарушению периодичности зависимостей, что особенно видно на зависимости $V(t)$. Для каждого домена выполнение условия плавления $V > V_{c0}$ будет происходить в различные моменты времени, поскольку критическая скорость V_{c0} (1.8) 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 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 блока V , поскольку упругие составляющие сил трения $F[i][j]$ становятся равными нулю. При этом 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 $V < V_c^0$ опять же для всех доменов происходит в разное время, поэтому при затвердевании формируется неоднородная доменная структура. Стоит отметить, что хотя зависимости, приведенные на рис. 1.5 не являются строго периодическими, они близки к периодическому виду, что подтверждают также исследования пове-

дения взаимодействующих шероховатых поверхностей при их взаимном перемещении с учетом упругости [30]. Отметим, что прерывистый режим движения *stick – slip*, показанный на рис. 1.5, наблюдался Боуденом и Тейбором более 50 лет назад [31] при проведении экспериментов по определению влияния молекулярного веса полимеров на коэффициент трения.

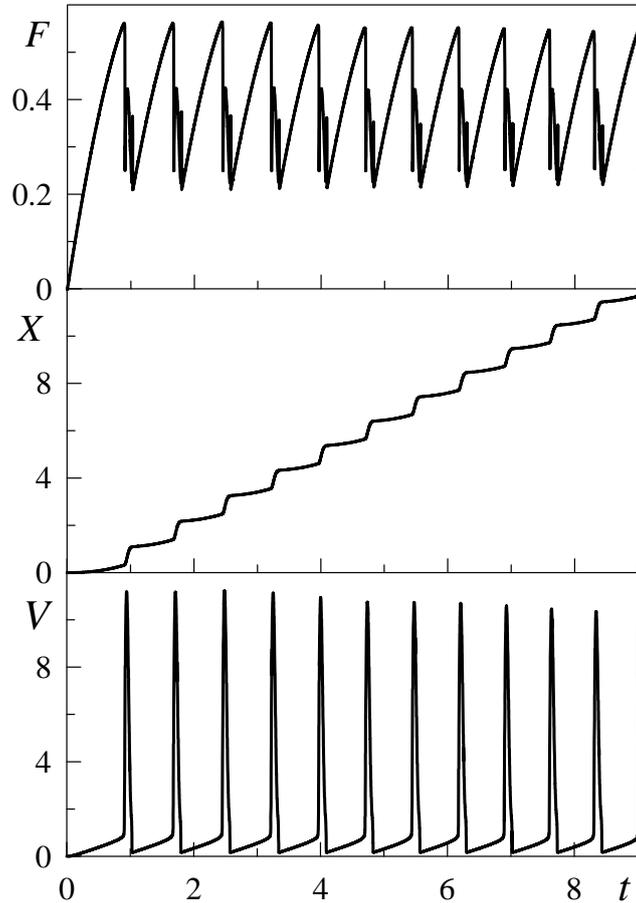


Рисунок 1.5 – Зависимости силы трения F (mN), координаты верхнего блока X (μm) и его скорости V ($\mu\text{m/s}$) от времени t (s) при параметрах рис. 1.1 и $k = 1.5 \cdot 10^5 \text{ Pa}\cdot\text{s}^{1/3}$, $\gamma = -2/3$, $\delta = 100 \text{ J}^{-1}\cdot\text{m}^3/\text{s}$, $K = 600 \text{ N/m}$, $M = 0.5 \text{ kg}$, $T = 200 \text{ K}$, $V_0 = 1400 \text{ nm/s}$

Рассмотрим более подробно переход между кинетическим режимом скольжения и сухим трением. На рис. 1.6 приведены зависимости силы трения F и скорости скольжения V от времени, показанные на рис. 1.5, однако для ограниченного промежутка времени. На рисунке выбраны четыре момента времени, для которых приведены распределения значений параметра порядка φ по площади скольжения. Координаты x и y на этих рисунках соответ-

ствуют значениям, показанным на рис. 1.4 для верхней трущейся поверхности. Координаты X точек поверхностей верхнего трущегося блока могут быть рассчитаны как

$$X = x + sS_{x,y}, \quad (1.20)$$

где переменная сдвига s (1.17) для 4-х увеличивающихся на рис. 1.6 моментов времени принимает значения 161, 162, 174, 174. Проанализируем полученные данные.

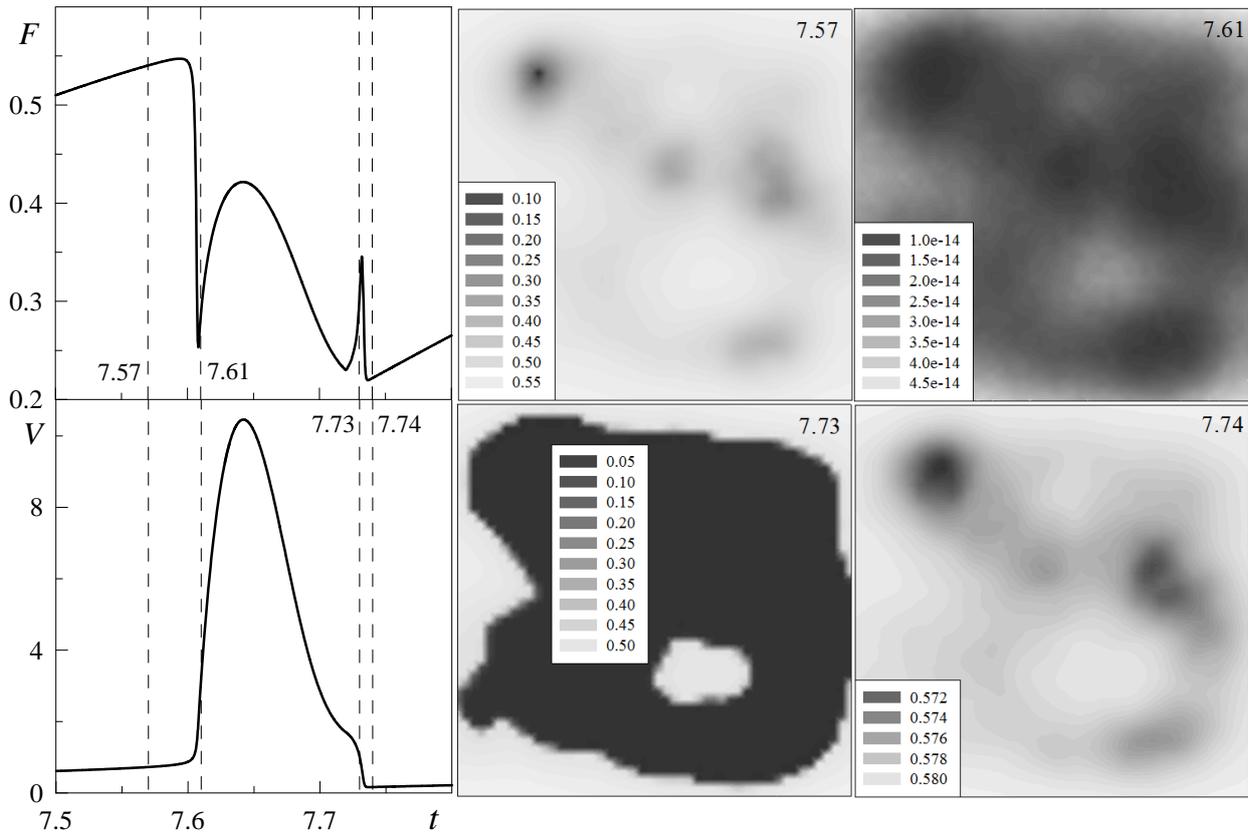


Рисунок 1.6 – Зависимости $F(t)$ и $V(t)$, приведенные на рис. 1.5 на отрезке времени $t \in [7.5, 7.8]$ (s) и распределение значений параметра порядка $\varphi(x,y)$ по площади контакта поверхностей для четырех выбранных моментов времени $t = 7.57, 7.61, 7.73, 7.74$ (s)

Как видно на зависимости $F(t)$, в момент времени $t = 7.57$ s 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 $t = 7.61$ s 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 D . Таким образом, все домены находятся в расплавленном состоянии. В следующий рассматриваемый момент времени $t = 7.73$ s 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 ($t = 7.74$ s) все домены характеризуются значением $\varphi > 0$, однако на соответствующей зависимости $\varphi(x, y)$ есть более темные участки, для которых модуль сдвига принимает меньшее значение. 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 материале. 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 системах, 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 [8]. Отметим, что зависимость силы трения от времени, приведенная на рис. 1.6, имеет особенности (два максимума после плавления), подробно описанные ранее в работе [22].

2 УЧЕТ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ НЕОДНОРОДНОСТИ

2.1 Свободная энергия

В рамках модели фазового перехода первого рода с учетом пространственной неоднородности выражение для плотности свободной энергии смазки, зажатой между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями, запишется в виде [7, 9, 21, 22]:

$$f = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4 + \frac{g}{2}(\nabla\varphi)^2, \quad (2.1)$$

где T – температура смазки, T_c – критическая температура, ε_{el} – сдвиговая упругая деформация, α, a, b, c – положительные постоянные. В выражении (2.1) введен параметр порядка φ , представляющий амплитуду периодической части микроскопической функции плотности среды [7, 9]. В жидкоподобной фазе устанавливается стационарное значение $\varphi_0 = 0$, в твердоподобной $\varphi_0 \neq 0$.

В однородном случае ($\nabla \equiv 0$) потенциал (2.1) обладает экстремумами, определяемыми выражением [21, 22]

$$\varphi_{\mp} = \frac{b}{2c} \mp \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{2\alpha(T - T_c)}{c}\right)}, \quad (2.2)$$

где φ_- отвечает максимуму потенциала (2.1), а φ_+ – минимуму. Значения φ_{\pm} соответствуют стационарным состояниям смазки. Дополнительно к условию (2.2) всегда существует стационарное решение $\varphi_0 = 0$, отвечающее экстремуму потенциала при нулевом значении параметра порядка. Таким образом, плавление равноправно достигается двумя механизмами: обычное термодинамическое плавление при повышении температуры T , и “плавление сдвигом” за счет механического воздействия с увеличением упругой деформации.

ции ε_{el} .

2.2 Разностная схема, начальные и граничные условия

Для исследования кинетики процесса плавления запишем уравнение Ландау-Халатникова [22, 28]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\delta \frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad (2.3)$$

где введен кинетический коэффициент δ . Будем полагать, что за счет тонкости смазочного слоя и фиксированного расстояния между поверхностями трения по толщине смазки можно считать однородной. В этом случае уравнение (2.3) запишется в явном виде:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\delta (2\alpha (T - T_c) \varphi + a\varphi\varepsilon_{el}^2 - b\varphi^2 + c\varphi^3) + g\delta \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right) + \xi(t), \quad (2.4)$$

где x и y — координаты по плоскости смазки. В (2.4) дополнительно введено стохастическое слагаемое $\xi(t)$, представляющее малые аддитивные флуктуации, учет которых необходим из-за особенностей дальнейшего численного счета [21, 22]. Уравнение (2.4) является двумерным дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа. Процедура численного решения такого типа уравнений хорошо известна. Приведем 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. 2.1а). Пускай n — порядковый номер точки деления по оси t , j — по оси x и k — по оси y . При

этом эти порядковые номера принимают следующие значения:

$$\begin{aligned} n &= 0, 1, 2, \dots, M; \\ j &= 1, 2, 3, \dots, N_x; \\ k &= 1, 2, 3, \dots, N_y. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Согласно (2.5) значения переменных x , y и t в произвольной точке пространственно-временной сетки будут определяться как

$$\begin{aligned} t^n &= n\Delta t; \\ x_j &= (j-1)H_x; \\ y_k &= (k-1)H_y, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где Δt — интервал разбиения по времени, а H_x и H_y — интервалы разбиения по координатам x и y соответственно. Для решения уравнения (2.4) будем использовать явную разностную схему. При этом производные, входящие в уравнение, аппроксимируются следующим образом (см. рис. 2.1б):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi_{j,k}^{n+1} - \varphi_{j,k}^n}{\Delta t}, \quad (2.7)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_{j+1,k}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j-1,k}^n}{H_x^2}, \quad (2.8)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{\varphi_{j,k+1}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n}{H_y^2}. \quad (2.9)$$

При подстановке последних выражений в уравнение (2.4) получим явную разностную схему. Согласно разностному шаблону (рис. 2.1б), 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 (2.4), получим:

$$\begin{aligned} \varphi_{j,k}^{n+1} = & \varphi_{j,k}^n + \frac{g\delta\Delta t}{H_x^2} (\varphi_{j+1,k}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j-1,k}^n) + \frac{g\delta\Delta t}{H_y^2} (\varphi_{j,k+1}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n) - \\ & - \delta\Delta t \left(2\alpha (T - T_c) \varphi_{j,k}^n + a\varphi_{j,k}^n \varepsilon_{el}^2 - b (\varphi_{j,k}^n)^2 + c (\varphi_{j,k}^n)^3 \right) + \sqrt{\Delta t} W_{j,k}^n \end{aligned} \quad (2.10)$$

Здесь введена функция Бокса-Мюллера, адекватно описывающая стохастический источник $\xi(t)$ [32]:

$$W_{i,j}^n = \sqrt{2D} \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_i \in (0, 1], \quad (2.11)$$

где r_1, r_2 – псевдослучайные числа с равномерным распределением. В ранних работах [21, 22] показано, что при взаимном перемещении поверхностей трения в слое смазочного материала возникают упругие деформации ε_{el} , которые можно выразить через толщину смазки h и относительную скорость сдвига трущихся поверхностей V :

$$\varepsilon_{el} = \frac{V\tau_\varepsilon}{h}, \quad (2.12)$$

где τ_ε – максвелловское время релаксации внутренних напряжений [7].

Далее рассмотрим ситуацию, когда $H_x = H_y = H$. При этом учитывая (2.12) уравнение (2.10) можно записать в более удобном для решения виде:

$$\begin{aligned} \varphi_{j,k}^{n+1} = & \varphi_{j,k}^n + \frac{g\delta\Delta t}{H^2} (\varphi_{j+1,k}^n + \varphi_{j,k+1}^n - 4\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n + \varphi_{j-1,k}^n) - \\ & - \delta\Delta t \left(2\alpha (T - T_c) \varphi_{j,k}^n + a\varphi_{j,k}^n \left(\frac{V\tau_\varepsilon}{h} \right)^2 - b (\varphi_{j,k}^n)^2 + c (\varphi_{j,k}^n)^3 \right) \\ & + \sqrt{\Delta t} W_{j,k}^n. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Для численного решения уравнения (2.13) его необходимо дополнить началь-

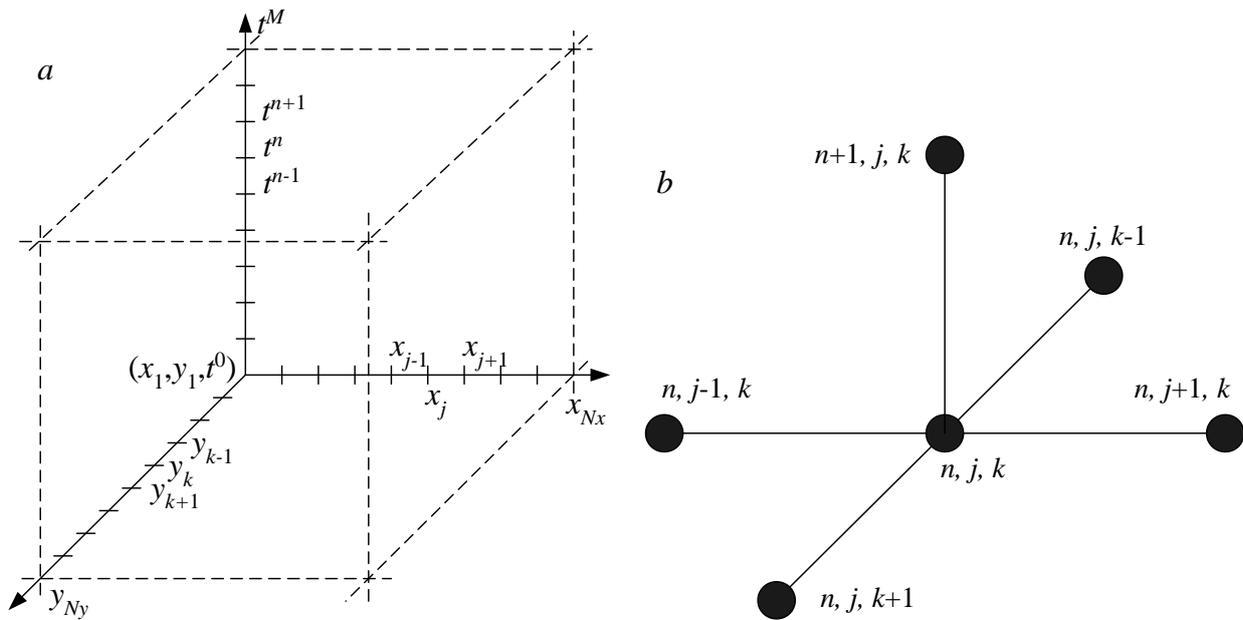


Рисунок 2.1 — а — трехмерная разностная сетка для решения уравнения (2.10) [(2.13)]; б — разностный шаблон, характеризующий явную разностную схему (соотношения (2.7)–(2.9))

ными и граничными условиями, которые представляются в виде

$$\varphi_{j,k}^0 = \zeta(x_j, y_k); \quad (2.14)$$

$$\varphi_{1,k}^{n+1} = f_1(t^{n+1}, y_k); \quad (2.15)$$

$$\varphi_{N_x,k}^{n+1} = f_2(t^{n+1}, y_k); \quad (2.16)$$

$$\varphi_{j,1}^{n+1} = \phi_1(t^{n+1}, x_j); \quad (2.17)$$

$$\varphi_{j,N_y}^{n+1} = \phi_2(t^{n+1}, x_j), \quad (2.18)$$

где первое условие (2.14) представляет начальные условия на нулевом временном слое (см. рис. 2.1а), а остальные 4 условия (2.15)–(2.18) описывают значения переменной φ на границах рассматриваемой системы (см. рис. 2.1). Условия (2.14)–(2.18) выбираются из физического представления задачи.

Для адекватного выбора начальных и граничных условий рассмотрим аналог SFA (surface force apparatus) [1]. Указанный аппарат широко используется для экспериментального исследования трения атомарно-гладких по-

верхностей, разделенных ультратонкой пленкой смазочного материала при различных толщинах смазочного слоя, нагрузках на систему, и т.д. В эксперименте трущиеся поверхности погружены в жидкость, которая представляет смазку. 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, будем считать, что на границах системы смазочный материал свои свойства теряет не резко. Это позволяет для численного решения системы уравнений (2.13) применить периодические граничные условия, что эквивалентно "заворачиванию" пространственной плоскости, показанной на рис. 2.1а в тор. Такой подход позволяет используя сравнительно небольшое количество разбиений по обоим осям рассматривать бесконечные системы, в которых отсутствуют краевые эффекты. При этом в соотношениях (2.13) 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 использовании условий (2.15)–(2.18) 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.

2.3 Трибологическая система

Выражение (2.13) вместе с набором начальных и граничных условий (2.14)–(2.18) дает $(M + 1)N_xN_y$ уравнений¹, что как раз равно количеству узлов пространственно-временной решетки, показанной на рис. 2.1а.² Однако в уравнение (2.13) 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. 1.2. Система, приведенная на рис. 1.2, состоит из пружины с жесткостью K , блока массой M , который скользит по поверхности, отделенной от него слоем смазочного материала толщиной h . Свободный конец пружины приводится в движение с фиксированной скоростью V_0 . При скольжении блока по поверхности между ними возникает сила трения F , определяемая формулой [21, 22]:

$$F = \left[a\varphi^2\varepsilon_{el} + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (2.19)$$

где A — площадь контакта трущихся поверхностей, k — феноменологический коэффициент, задающий зависимость вязкости смазочного материала от градиента скорости сдвига. В формуле (2.19) первое слагаемое в скобках представляет упругие напряжения, второе — вязкие [21, 22]. Поскольку в нашем случае поверхности разбиваются пространственной сеткой, которая содержит N_x узлов по оси x и N_y — по оси y , формула (2.19) для n -того вре-

¹ В случае использования периодических граничных условий соотношения (2.15)–(2.18) заменяются таким же количеством уравнений (2.13) при $j = 1, j = N_x, k = 1, k = N_y$.

² При подсчете количества независимых уравнений следует учитывать, что $f_1(t^{n+1}, y_1) = \phi_1(t^{n+1}, x_1)$, $f_1(t^{n+1}, y_{N_y}) = \phi_2(t^{n+1}, x_1)$, $f_2(t^{n+1}, y_1) = \phi_1(t^{n+1}, x_{N_x})$, $f_2(t^{n+1}, y_{N_y}) = \phi_2(t^{n+1}, x_{N_x})$. Для соответствующих функций это видно из левых частей уравнений (2.15)–(2.18), а также непосредственно из рис. 2.1а, так как указанные значения лежат на вертикальных ребрах куба, являющихся общими для стыков вертикальных граней, на которых и выбираются граничные условия.

менного слоя с учетом (2.12) запишется в виде

$$F = \frac{AV}{N_x N_y h} \sum_{j=1}^{N_x} \sum_{k=1}^{N_y} \left[a(\varphi_{j,k}^n)^2 \tau_\varepsilon + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h} \right)^\gamma \right]. \quad (2.20)$$

В (2.20) 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. 2.1а.

Координата верхней трущейся поверхности X может быть рассчитана согласно уравнению движения вида [7, 8, 22]:

$$M\ddot{X} = K(V_0 t - X) - F, \quad (2.21)$$

где выражение в скобках представляет растяжение пружины ΔX , а t — время движения ее свободного конца. Теперь у нас есть все необходимые для решения условия и уравнения, и система (2.13), (2.21) может быть решена численно.

2.4 Результаты моделирования и обсуждение

Результат численной реализации процедуры (2.11), (2.13), (2.14), (2.20) и (2.21) с учетом соотношения $\dot{X} = V$ приведен на рис. 2.2.

На рисунке показаны 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 параметрах, при которых в системе устанавливается прерывистый режим движения, когда смазка периодически плавится и затвердевает,

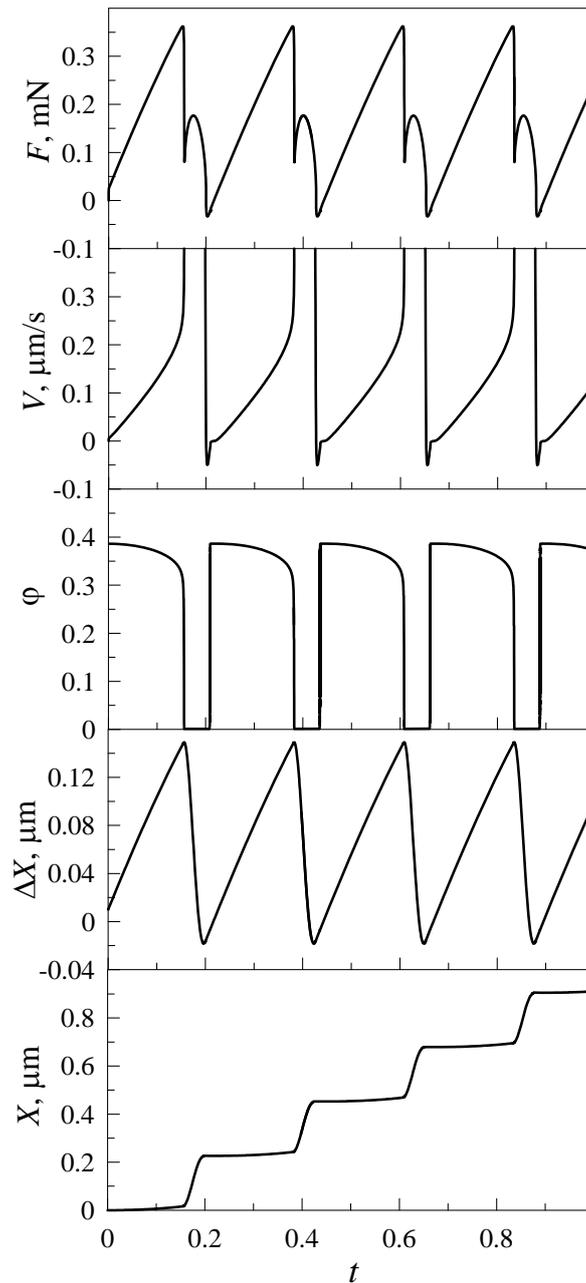


Рисунок 2.2 – Зависимости силы трения F , скорости блока V , параметра порядка φ , натяжения пружины ΔX и координаты блока X от времени t при параметрах $N_x = N_y = 150$, $dt = 10^{-7}$ (10^{-8}) s, $D = 10^{-30}$ s $^{-1}$, $g/H^2 = 10$ (10^4) J/m 3 , $\alpha = 0.95$ J·K $^{-1}$ /m 3 , $T_c = 290$ K, $a = 4 \cdot 10^{12}$ Pa, $b = 230$ J/m 3 , $c = 850$ J/m 3 , $h = 10^{-9}$ m, $\tau_\varepsilon = 10^{-8}$ s, $A = 0.3 \cdot 10^{-9}$ m 2 , $k = 3 \cdot 10^4$ Pa·s $^{1/3}$, $\gamma = -2/3$, $\delta = 100$ J $^{-1}$ ·m 3 /s, $K = 2500$ N/m, $M = 0.4$ kg, $T = 270$ K, $V_0 = 1000$ nm/s

а сила трения F имеет пилообразную зависимость от времени t [8]. Механизм возникновения прерывистого режима в рассматриваемом случае аналогичен механизму, подробно описанному в работе [22], где исследуется однородный случай без учета соответствующих градиентных вкладов. Несмотря

на то, что в данной работе проводится учет пространственной неоднородности, из рисунка видно, что устанавливающийся режим представляет периодический режим прерывистого трения. При выбранных параметрах после плавления смазки (скачкообразное уменьшение силы трения F и одновременное резкое увеличение величины сдвиговой скорости V) и последующего снижения скорости за счет проскальзывания трущегося блока на существенное расстояние пружина сжимается ($\Delta X < 0$), после чего трущийся блок некоторое время движется в противоположном направлении ($V < 0$). Такой тип движения называется реверсивным и часто наблюдается в экспериментах по исследованию режима граничного трения. Из зависимости $\varphi(t)$ видно, что когда смазка расплавлена ($\varphi \approx 0$), скорость движения блока существенно увеличивается, за счет чего он за 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 ранее 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 элементов). Зависимость $\varphi(t)$ визуально является гладкой и непрерывной, что свидетельствует о том, что все элементы массива принимают одинаковые значения. Однако начальные условия выбирались случайным образом (см. последнее предложение второго раздела). Из этого следует, что смазочный слой после быстрой релаксации приобретает однородную структуру (характеризуется одинаковыми значениями φ по плоскости временного слоя). Причем релаксация к однородному состоянию при выбранных начальных условиях осуществляется настолько быстро, что режим движения стаци-

онарен уже при малых начальных временах (зависимости на рис. 2.2 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 (2.13)). Отметим, что уравнения решались при различных значениях отношения g/H^2 (от 10 J/m^3 до 10^4 J/m^3). При этом расчеты показали, что получаемые зависимости при различных g/H^2 из указанного диапазона в точности повторяют приведенные на рис. 2.2. 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 (2.13) является условно устойчивой, и требует уменьшения шага интегрирования dt при увеличении параметра g/H^2 . Например, в случае, если уравнения (2.13) не содержат вторую скобку при $\delta\Delta t$ (обычное уравнение теплопроводности), условие устойчивости итерационной процедуры запишется как

$$\Delta t \leq \frac{H^2}{4g\delta}, \quad (2.22)$$

что при $g/H^2 = 10 \text{ J/m}^3$ дает условие $dt \leq 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$, а при $g/H^2 = 10^4 \text{ J/m}^3$ приводит к значению $dt \leq 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$. Поэтому, как это следует из подписи к рис. 2.2, для численного решения уравнений в зависимости от параметров выбиралось два значения dt (либо 10^{-7} s , либо 10^{-8} s).

На рис. 2.2 в том числе приведена и 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. 2.3 дополнительно показаны зависимости величины φ от скорости сдвига V . Причем кривая 2 здесь соответствует выражению (2.2). На указанной зависимости реализуется гистерезис, т.е. смазка плавится и затвердевает при различных значениях скорости сдвига.

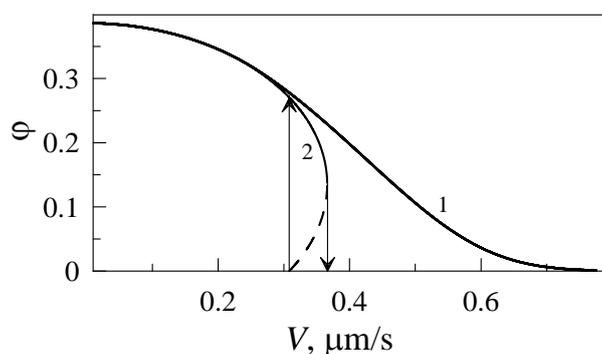


Рисунок 2.3 – Зависимость значения параметра порядка φ (безразмерная величина) от скорости сдвига V . Кривая 2 получена по формуле (2.2), кривая 1 соответствует рис. 2.2

Таким образом, выбранный вид потенциала (2.1) соответствует реализации в системе фазового перехода первого рода. Кривая 1 соответствует рис. 2.2. То есть эта кривая состоит из точек, и на ней приведены все значения φ , показанные на рис. 2.2, для всех циклов плавление/затвердевание. Поскольку кривая является гладкой, это еще раз подтверждает периодичность зависимостей, приведенных на рис. 2.2. Кривые 1 и 2 на рис. 2.3 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 ((1.2) или (1.8)) происходит процесс непрерывной релаксации параметра φ к нулевому значению, а за это время за счет снижения силы трения трущийся блок успеваеет разогнаться до существенных скоростей V . Из зависимостей $V(t)$ и $\varphi(t)$, приведенных на рис. 2.2 следует, что параметр φ после плавления принимает ненулевое значение, показанное на рис. 2.3, при больших скоростях сдвига V за довольно малый промежуток времени. 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. Это один из возможных путей описания так называемых ”эффектов памяти“, которые наблюдаются в рассматриваемых системах [8].

3 ВЛИЯНИЕ УНИВЕРСАЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ УЛЬТРАТОНКОЙ ПЛЕНКИ СМАЗКИ НА РЕЖИМ ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯ

3.1 Основные уравнения

Для изучения динамических свойств ультратонких пленок смазок рассмотрим упрощенный аналог трибологической системы, представленный на рис. 1.2.

Система состоит из двух блоков, разделенных ультратонкой пленкой смазки толщиной h . Нижний блок фиксирован, а верхний, масса которого M , скользит на нем. Внешний привод прикреплен к нему пружиной жесткостью K и движется с фиксированной скоростью V_0 . Во время движения свободного конца пружины в движение приводиться и верхний блок, но поскольку между блоками генерируется сила трения F , скорости верхнего блока V и внешнего привода V_0 в общем случае не совпадают.

Следует отметить, что в рамках рассматриваемой модели, площадь контакта A представляет собой реальную площадь контактирующих участков. Поскольку рассматриваются атомарно-гладкие поверхности, то она стремится к видимой площади. При проведении экспериментов в качестве трущихся поверхностей используют слюду, поэтому такое предположение вполне соответствует действительности. На поверхностях, которые используются в промышленности, реализуется порядка $10^3 - 10^5$ микроконтактов [2, 13], поэтому отношение реальной площади к видимой $A_{real}/A_{visible}$ составляет приблизительно $\sim 10^{-5}$. При этом с приложением внешней нагрузки поверхности сближаются, смазка выдавливается из-под них и количество таких точечных контактов увеличивается. В рамках нашей модели рассматриваются атомарно-гладкие поверхности, расстояние между которыми устанавливается фиксирова-

ным, поэтому внешняя нагрузка в явном виде не учитывается.

Для определения упругой компоненты напряжения запишем разложение свободной энергии в ряд по степеням параметра порядка φ [7, 9]:

$$f = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4, \quad (3.1)$$

где T – температура смазки, T_c – критическая температура, ε_{el} – сдвиговая компонента упругой деформации, α, a, b, c – положительные постоянные, φ – параметр порядка, представляющий амплитуду периодической части микроскопической функции плотности среды [7, 9]. Такой вид разложения соответствует модели фазового перехода второго рода [18, 23]. При этом в твердоподобной фазе смазка упорядочена, и параметр порядка принимает ненулевые значения. В жидкоподобной фазе смазка разупорядочена, поэтому амплитуда стремится к нулю и в системе устанавливается стационарное значение $\varphi_0 = 0$.

Определим упругие напряжения как $\sigma_{el} = \partial f / \partial \varepsilon_{el}$ [7]:

$$\sigma_{el} = a\varphi^2\varepsilon_{el} = \mu\varepsilon_{el}, \quad (3.2)$$

здесь введен модуль сдвига μ . Он равняется нулю в жидкоподобном состоянии смазки $\mu = 0$.

Согласно принципу минимума энергии система стремится занять состояние, соответствующее минимуму свободной энергии $f(\varphi)$ (3.1), независимо от начальных условий. Для рассмотрения возможных стационарных состояний системы введем функцию.

$$B(\varepsilon_{el}, T) = a\varepsilon_{el}^2 + 2\alpha(T - T_c). \quad (3.3)$$

Анализ данной функции позволяет выделить три таких случая. При выполнении условия $B(\varepsilon_{el}, T) \leq 0$ в системе реализуется ненулевой минимум и твердо-

подобное состояние смазки, на рис. 3.1 представлен кривыми при температурах $T = 250 \div 280$ К. В промежуточном диапазоне $0 < B(\varepsilon_{el}, T) < b^2/(4c)$ (панель b рис. 3.1) нулевой минимум отделен от ненулевого максимумом, поэтому смазка может быть как твердоподобной, так и жидкоподобной и ее состояние зависит от начальных условий. В случае $B(\varepsilon_{el}, T) \geq b^2/(4c)$, представленном при $T > 289$ К на рис. 3.1, реализуется единственный минимум при значении параметра порядка $\varphi = 0$, при этом смазка жидкоподобна. Следует отметить, что значения $\varphi < 0$ не рассматриваются, т.к. параметр φ представляет собой амплитуду периодической функции плотности среды и отрицательные значения не имеют физического смысла.

Стационарные значения параметра порядка φ определяется корнями уравнения $\partial f/\partial \varphi = 0$ [21, 22]:

$$\varphi_{\mp} = \frac{b}{2c} \mp \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{2\alpha(T - T_c)}{c}\right)}, \quad (3.4)$$

где φ_- отвечает неустойчивому стационарному состоянию, поскольку соответствует максимуму потенциала (3.1). Устойчивое состояние представляется значением φ_+ и минимумом потенциала f (3.1).

Воспользуемся (1.7) для определения критических значений температуры и скорости плавления и затвердевания. При малых значениях температуры T и скорости сдвига V (ε_{el}) смазка твердоподобна, поскольку стационарное значение $f(\varphi)$ принимает ненулевое значение, т.к. $B(\varepsilon_{el}, T) \leq 0$. При превышении температурой T критического значения

$$T_c^0 = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h}\right)^2 + \frac{b^2}{8\alpha c}, \quad (3.5)$$

смазка плавится, при этом параметр порядка скачкообразно становится нулевым. С дальнейшим повышением температуры смазка остается жидкоподобной. Если после такого перехода понижать температуру, то смазка затвердеет

уже при меньшем значении температуры T :

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h} \right)^2, \quad (3.6)$$

при этом параметр порядка φ снова скачкообразно принимает ненулевые значения. Таким образом, в промежуточном диапазоне температур $T_c^0 < T < T_{c0}$ потенциал характеризуется двумя минимумами, разделенными одним максимумом, поэтому зависимость $\varphi(T)$ имеет гистерезисный характер, что соответствует фазовому переходу Ландау первого рода.

Критическую скорость плавления можно получить аналогично, или выразить из (3.5). Как и в предыдущем случае при превышении скоростью сдвига V критического значения

$$V_c^0 = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{4\alpha c}} \quad (3.7)$$

смазка плавится. А затвердевает, когда скорость сдвига становится меньше значения

$$V_{c0} = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}. \quad (3.8)$$

На рис. 3.1 представлена зависимость плотности свободной энергии (3.1) от параметра порядка при изменении температуры. Как видно на рисунке, при $T < T_c^0$ смазка твердоподобна, поскольку реализуется отличное от нуля значение параметра порядка $\varphi_0 \neq 0$. С повышением температуры изменяется профиль свободной энергии: минимальное значений энергии постепенно возрастает, это свидетельствует о том, что для плавления необходимы меньшие возмущения системы. С дальнейшим повышением температуры $T > T_{c0}$ смазка жидкоподобна, т.к. устанавливается нулевое значение параметра порядка $\varphi_0 = 0$.

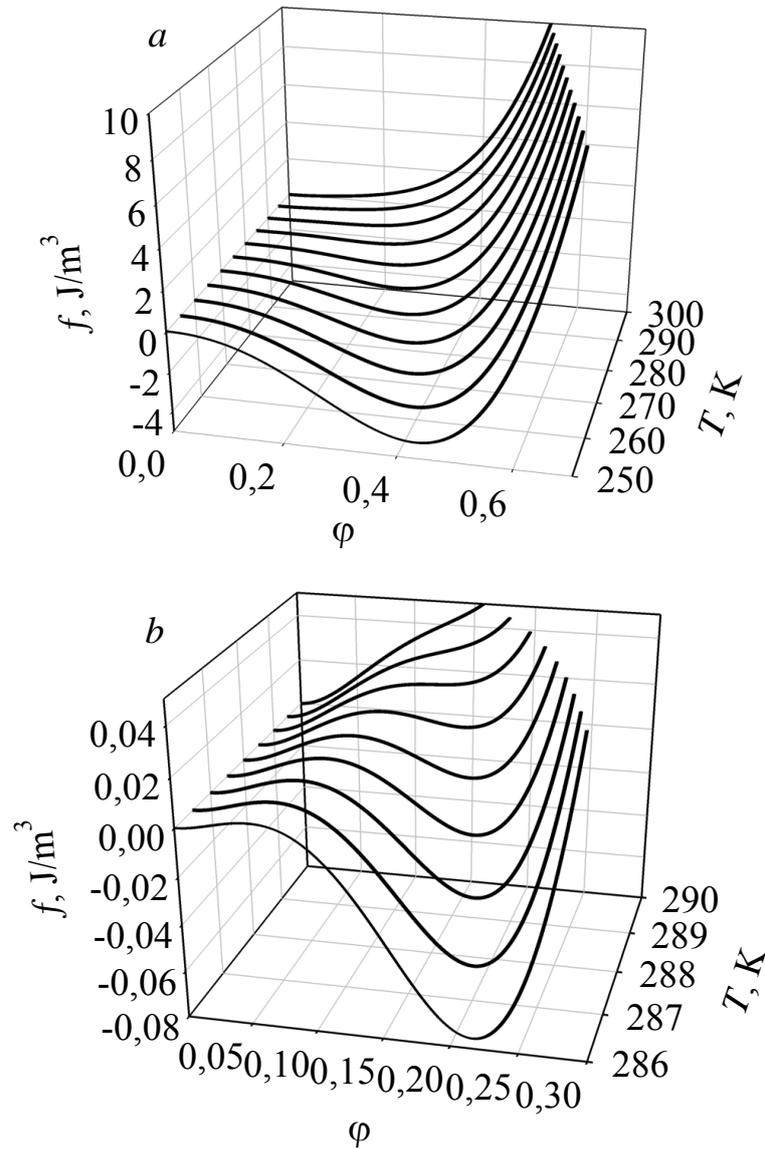


Рисунок 3.1 – Зависимость плотности свободной энергии f (3.1) от параметра порядка φ (безразмерная величина) и температуры смазки T при $\alpha = 0.95 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} / \text{m}^3$, $T_c = 290 \text{ K}$, $a = 4 \cdot 10^{12} \text{ Pa}$, $b = 230 \text{ J/m}^3$, $c = 850 \text{ J/m}$, $\epsilon_{el} = 2.1$

3.2 Учет температурной зависимости вязкости

Для рассмотрения вязкой компоненты напряжений σ_v воспользуемся моделью, которая учитывает зависимость вязкости от скорости деформации [20, 25]

$$\sigma_v = \eta_{eff} \dot{\epsilon}, \quad (3.9)$$

где η_{eff} представляет эффективную вязкость.

Представим эффективную вязкость в виде модели, полученной авторами работы [25]:

$$\eta_{eff} = 10^C (\dot{\varepsilon})^{-n}, \quad (3.10)$$

где параметры $C(n)$ и n зависят от температуры.

Экспериментально получены зависимости этих величин при проведении исследования методом молекулярной динамики для смазок состоящих из полимерных цепных молекул углеродов C_nH_{2n+2} , имеющих в своем составе 20, 100 и 1400 атомов углерода. Установлено, что величина n изменяет свои значения от 0, что соответствует жидкоподобному состоянию смазки при больших температурах, до $n = 1$ – твердоподобное состояние при низких температурах. Соотношение между температурой T и показателем n атомами работы [25] получено в виде:

$$n = \frac{1}{1 + (T/T_k)^\beta}, \quad (3.11)$$

где параметры T_k и β определяются экспериментально и зависят от типа используемого полимера.

Для определения зависимости $C(n)$ воспользуемся зависимостью, полученной в работе [25]:

$$C = 10.9n - 3.8. \quad (3.12)$$

Остаточная сила трения записывается в виде

$$F = \left[\frac{a\varphi^2 V \tau_\varepsilon}{h} + \text{sgn}(V) 10^{10.9n-3.8} \left(\frac{|V|}{h} \right)^{1-n} \right] A. \quad (3.13)$$

Здесь первое слагаемое в квадратных скобках представляет упругие напряжения σ_{el} , определяемые соотношением (3.2), а второе – вязкие напряжения – комбинация (3.9) - (3.12). И дополнительно введена знаковая функция $\text{sgn}(V)$, для определения направления движения блока.

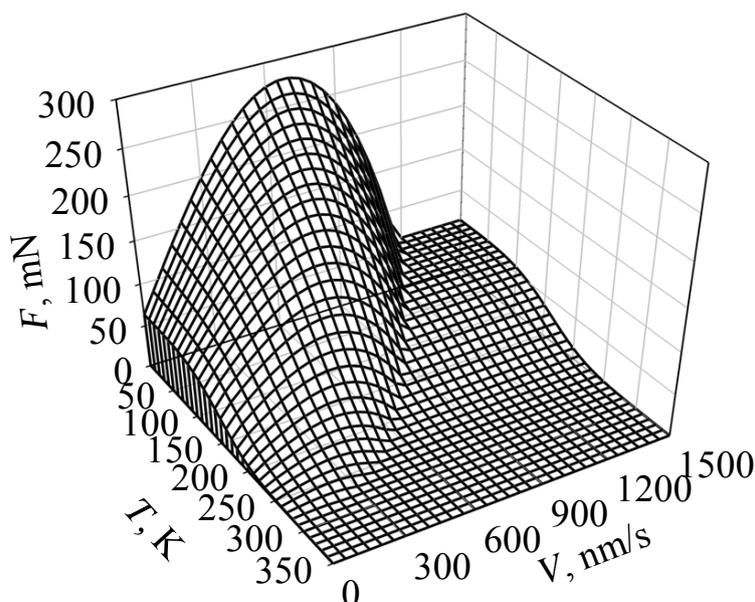


Рисунок 3.2 – Трехмерная зависимость силы трения $F(T, V)$ при параметрах рис. 3.1 и $T_k = 353$ К, $\beta = 4.09$, $A = 5 \cdot 10^{-9}$ м², $\tau_\varepsilon = 10^{-8}$ с, $h = 10^{-9}$ м

Трехмерная зависимость полной силы трения от температуры смазки T и скорости сдвига V представлена на рис. 3.2. Из рисунка видно, что при увеличении скорости сдвига сила трения изначально растет за счет роста обеих компонент напряжений σ_{el} и σ_v , достигает своего максимального значения, дальше убывает и при превышении критического значения V_c^0 смазка плавится. Дальнейший рост F происходит за счет увеличения вязких напряжений σ_v . При увеличении T сила трения уменьшается согласно соотношениям (3.10) – (3.13), поскольку показатель n изменяет свое значение от 1 до 0.

На рис. 3.3, *a* представлена зависимость силы трения от скорости сдвига в двойных логарифмических координатах. Из формулы (3.13) найдем предел силы трения $\lim F = 0, V \rightarrow 0, T \neq 0$ при скорости стремящейся к нулю.

На графике представлен диапазон скоростей $V = 10^{-300} - 10^{100}$ м/с. Этот диапазон выбран, поскольку особенности численного счета не позволяют построить зависимость при $V < 10^{-300}$ м/с. При температуре $T_1 = 20$ К сила трения со снижением скорости практически приближается к нулевому значению. При увеличении температуры до значений $T_2 = 80$ К и $T_3 = 100$ К

наблюдается аналогичная картина, но значение 0 будет достигнуто при еще меньших скоростях.

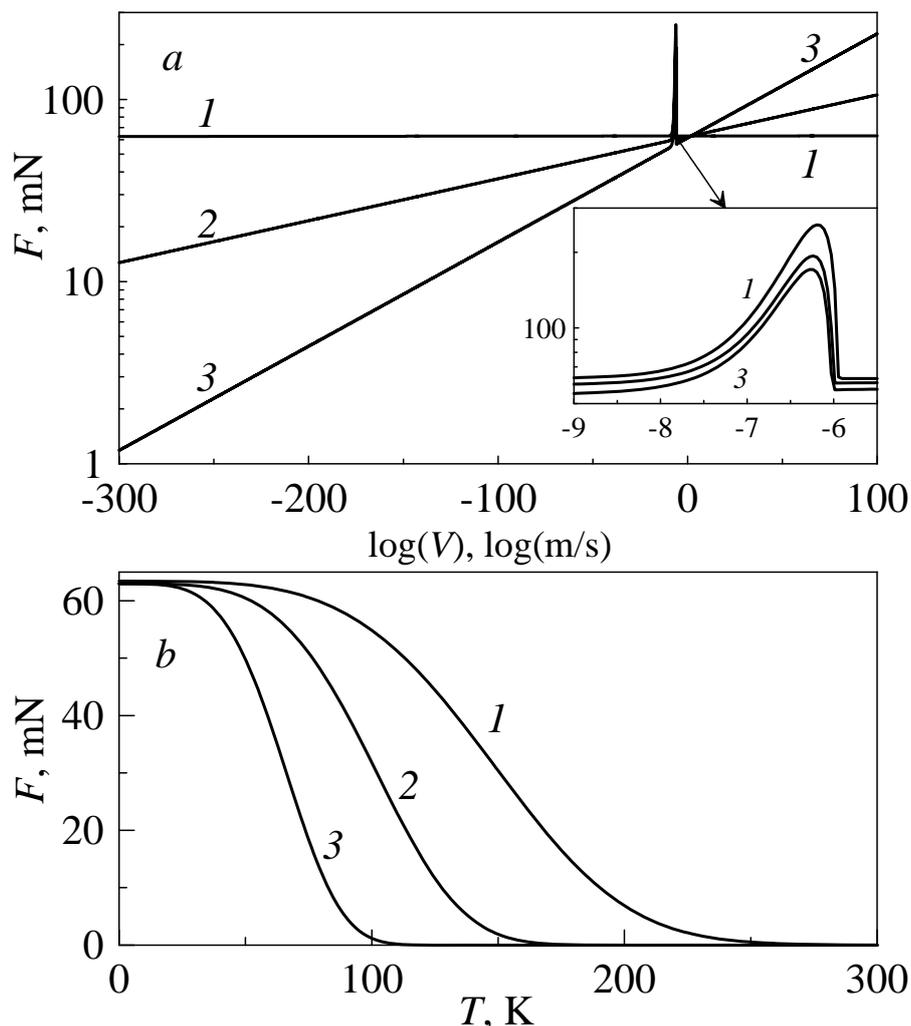


Рисунок 3.3 – Зависимость силы трения F от температуры T и скорости сдвига V . На панели *a* кривые 1 – 3 соответствуют температурам $T = 20, 80, 100$ К. На панели *b* кривые 1 – 3 построены при скоростях сдвига $V = 10^{-9}, 10^{-50}, 10^{-300}$ м/с

В диапазоне скоростей $V = 10^{-9} - 10^{-6}$ м/с на всех кривых просматриваются пики. На вставке к рис. 3.3, *a* представлены увеличенными фрагментами. Более подробно такое поведение представлено на трехмерном рис. 3.2, где меньшему значению температуры соответствует большее значение F . В данном диапазоне существенно влияние на силу трения оказывает вклад упругих напряжений. При $V > 10^{-6}$ м/с ($V > V_c^0$) смазка жидкоподобна, поскольку $\sigma_{el} = 0$. При $V < 10^{-9}$ м/с вклад σ_{el} стремится к нулю, поскольку соглас-

но (3.2) и (1.7) σ_{el} пропорциональны V . Снижение силы трения при скоростях $V < 1$ nm/s происходит настолько стремительно, что на рис. 3.2 она представлена “вертикальной” поверхностью.

На рис. 3.3, b представлена зависимость $F(T)$ при малых скоростях сдвига. Из рисунка видно, что снижение скорости приводит к уменьшению силы трения. Рассмотрим предел силы трения при T и V стремящимся к нулю:

$$\lim F = 10^{7.1} \cdot A, V \rightarrow 0, T \rightarrow 0. \quad (3.14)$$

Отсюда следует, что с учетом температурной зависимости вязкости при сверхнизких температурах и скоростях сдвига зависимость $F(T)$ подобна δ -функции, которая в нуле принимает конечное значение, определяемое по (3.14), а в остальных точках становится нулевой.

Для изучения кинетики плавления используем соответствующее уравнение Ланжевена [33]:

$$\frac{1}{\delta} \dot{\varphi} = -\frac{\partial f}{\partial \varphi} + \xi(t), \quad (3.15)$$

где δ — кинетический коэффициент, который характеризует инерционные свойства системы, а случайный процесс $\xi(t)$ представляет малые аддитивные флуктуации типа белого шума с моментами

$$\langle \xi(t) \rangle = 0; \quad \langle \xi(t) \xi(t') \rangle = 2D \delta(t - t'), \quad (3.16)$$

где введено интенсивность стохастического источника D , которая в случае теплового шума зависит от температуры и кинетического коэффициента. Такая интенсивность не в состоянии повлиять на процесс, однако его введение в рассмотрение связано особенностями последующих численных расчетов [21, 22].

3.3 Скольжение при длительной остановке внешнего привода

В экспериментальных работах проведены исследования поведения трибосистемы при коротких и длительных остановках внешнего привода [5, 8]. Установлено, что в зависимости от скорости движения, температуры смазки, приложенной внешней нагрузки возможны различные сценарии поведения системы. В работе [8] наблюдался переход системы из stick-slip режима в режим скольжения SF после остановки внешнего привода. Через время $t_s \sim 60$ s внешний привод снова приводился в движение и в системе снова устанавливался прерывистый stick-slip режим, при чем первый пик “striction” spike наблюдался большим, чем все остальные [5, 8]. При скорости сдвига выше критической V_c^0 после включения внешнего привода наблюдался один пик, после чего система продолжала функционировать в SF режиме [5]. К тому же высота пика зависит от времени остановки t_s [5].

На рис. 3.4 представлена зависимость силы трения F для различных значений температуры смазки T . При этом на протяжении времени 200 s внешний привод движется со скоростью $V_0 = 500$ nm/s, последующие $t_s = 1600$ s свободный конец пружины остается неподвижный, после чего он снова приводится в движение с начальной скоростью $V_0 = 500$ nm/s. Чтобы в системе стационарный режим трения устанавливался за минимальное время, выбраны начальные условия $X = 0$ μm , $\Delta X = 10$ μm , $V = 1$ nm/s, $\varphi = 0.4$. Рис. 3.4, *a* построен при температуре $T_1 = 150$ К. В данном случае в системе устанавливается режим сухого трения DF . При $t > 0$ внешний привод начинает движение, натяжение пружины ΔX увеличивается, растет скорость V , соответственно растут упругие σ_{el} и вязкие σ_v напряжения, система выходит на стационарный режим функционирования и сила трения F принимает постоянное значение. Через время $t = 200$ s внешний привод останавливается,

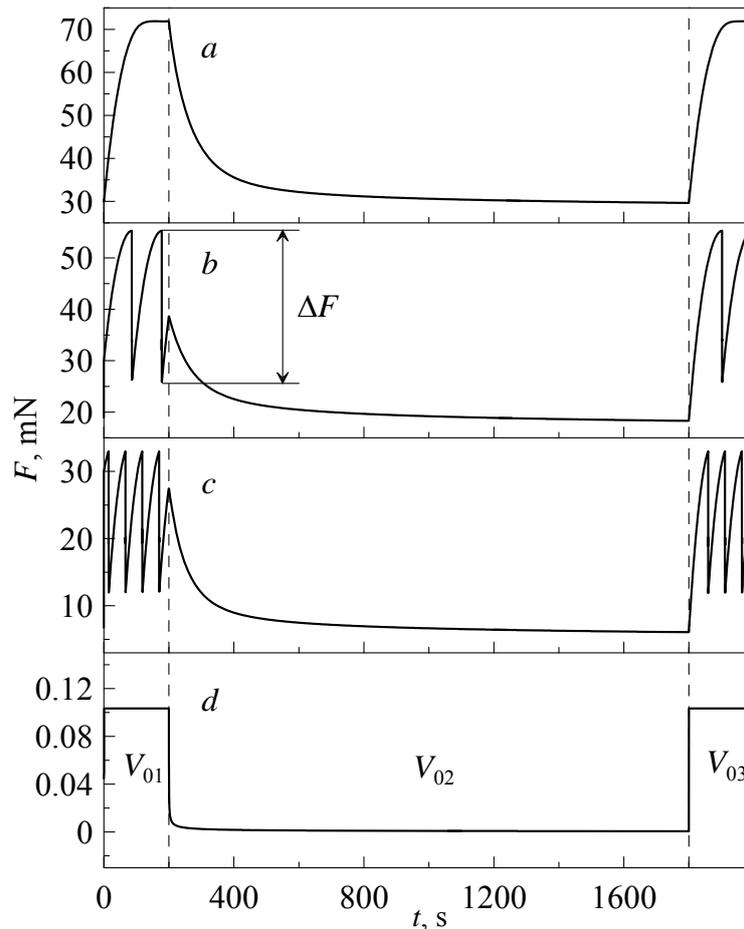


Рисунок 3.4 – Зависимость силы трения F (mN) от времени t (s) при параметрах рисунка 3.1 и $h = 10^{-9}$ м, $\tau_\epsilon = 10^{-8}$ с, $A = 5 \cdot 10^{-9}$ м², $\delta = 100$ J⁻¹·м³/с, $M = 0.4$ кг, $K = 3000$ N/м, $T_k = 353$ К, $\beta = 4.09$ и $V_{01} = 500$ нм/с, $V_{02} = 0$ нм/с, $V_{03} = 500$ нм/с. Панели $a - d$ соответствуют температурам $T = 150, 170, 200, 300$ К.

а блок продолжает движение за счет растянутой пружины. Со временем ΔX уменьшается, при этом наблюдается релаксация силы трения до стационарного значения. При этом скорость блока снижается, но остается ненулевой за счет растянутой пружины. Скорость V будет нулевой на очень длительном промежутке времени $t \rightarrow \infty$, поэтому такой случай не рассматривается.

Рис. 3.4, b построен при большем значении температуры $T_2 = 170$ К. В данном случае в системе наблюдается прерывистое движение stick-slip. После остановки внешнего привода смазка затвердевает, сила трения генерируется за счет упругих и вязких напряжений и релаксирует до значения соответствующее данной скорости и температуре. После включения внешнего приво-

да в системе снова устанавливается stick-slip режим движения как и до остановки блока. Панель *c* этого рисунка построена при температуре $T_3 = 200$ К. Поведение системы аналогично показанному на панели *b*, но большее значение температуры способствует увеличению частоты фазовых переходов и уменьшению ΔF . Дальнейшее увеличение температуры до значения $T_4 = 300$ К приводит к исчезновению прерывистого движения и установления режима жидкостного трения SF . При $0 < t < 200$ с смазка жидкоподобна, поскольку $T_4 > T_c$, поэтому сила трения имеет только вязкую σ_v компоненту напряжений. После остановки внешнего привода, $t > 200$ с, сила трения уменьшается на 3 – 4 порядка, поскольку до остановки пружина практически не была растянута, поэтому скорость блока $V = 1 \div 10^{-4}$ nm/s. После включения внешнего привода сила трения увеличивается до значения, соответствующее данной скорости и температуре смазки.

Как уже отмечалось выше, мы рассматриваем атомарно-гладкие поверхности, поэтому считается, что они полностью соприкасаются и внешняя нагрузка не учитывается. Если в реальных условиях прикладывать внешнюю нагрузку L , то поверхности сближаются, поскольку происходит выдавливание смазки и площадь прямого контакта увеличивается. Поведение системы при увеличении площади контакта A и неизменных остальных параметрах, что можно условно считать как увеличение внешней нагрузки L , представлено на рис. 3.5. Панели *a - d* этого рисунка построены при постепенном увеличении площади контакта A . Как показано в экспериментальных [8] работах, рост L приводит к уменьшению частоты фазовых переходов и увеличению максимального значения силы трения F . При этом растет и ΔF . После остановки внешнего привода в системе наблюдается релаксация силы трения F до стационарного значения. При этом для больших значений внешней нагрузки L наблюдается большее значение силы трения F [8, 20], поскольку она пропорциональна площади контакта A (3.13).

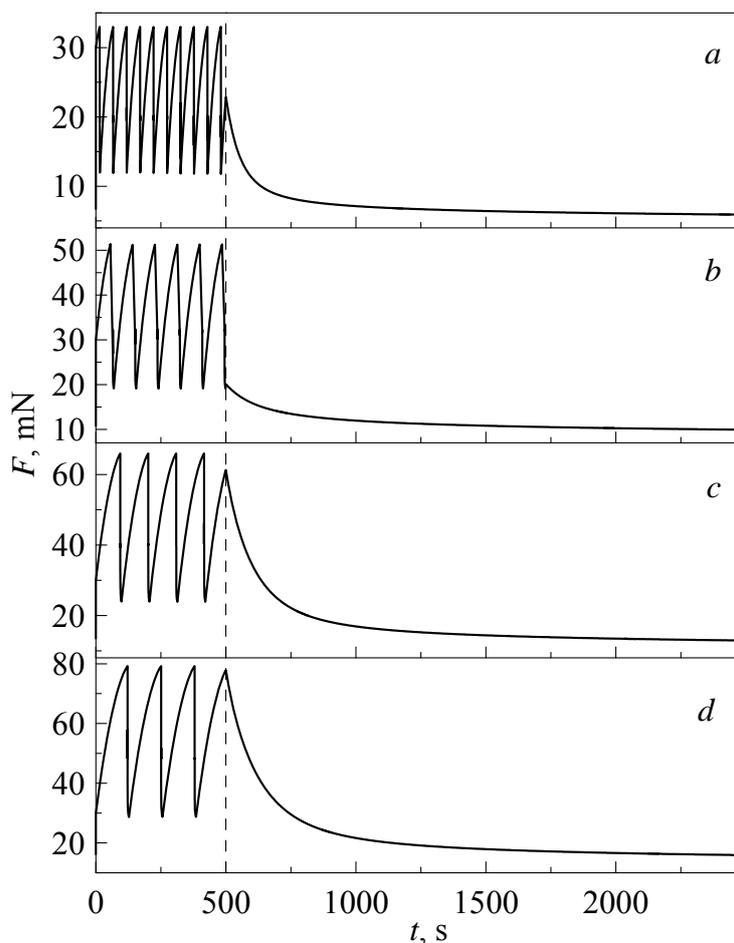


Рисунок 3.5 – Зависимость силы трения F (mN) от времени t (s) при различных площадях контакта A при параметрах рисунка 3.4 и $T = 200$ К, до штриховой линии $V_0 = 500$ nm/s, после – $V_0 = 0$ nm/s. Панели $a - d$ соответствуют площадям контакта $A = 5 \cdot 10^{-9}, 8 \cdot 10^{-9}, 10 \cdot 10^{-9}, 12 \cdot 10^{-9}$ m²

3.4 Зависимости силы трения для молекул смазки различной длины

Рассмотрим условия перехода от прерывистого движения к режиму жидкостного трения для различных углеводородов при постепенном увеличении температуры смазки T . На рис. 3.6 представлена данная зависимость. Панели $a - c$ построены при параметрах вязкости, полученных для алканов [25], которые имеют в своем составе 20, 100, 1400 атомов углерода, соответственно. Временной интервал разбит на три участка, каждый построен с повышением температуры T . Для каждого участка выбраны начальные условия

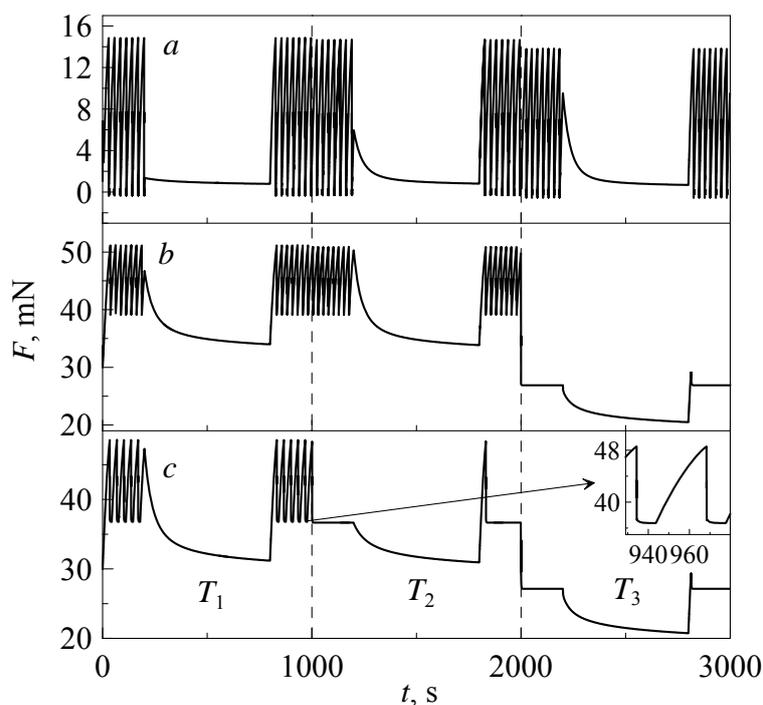


Рисунок 3.6 – Зависимость силы трения F (mN) от времени t (s) для различных алканов при параметрах рисунка 3.4 и $V_0 = 500$ nm/s до и после остановки. Выбраны начальные условия $\Delta X = 0.1 \mu\text{m}$, $V = 1$ nm/s, $\varphi = 0.4$. Участки $T_1 - T_3$ соответствуют температурам 237, 237.5, 270 К. Панель a соответствует параметрам $T_k = 343$ К, $\beta = 4.09$, панель $b - T_k = 642$ К, $\beta = 3.68$, панель $c - T_k = 840$ К, $\beta = 2.79$

$\Delta X = 0.1 \mu\text{m}$, $V = 1$ nm/s, $\varphi = 0.4$, на протяжении времени $t = 200$ s производится сдвиг внешнего привода со скоростью $V_0 = 500$ nm/s, дальше на протяжении времени $t_s = 600$ s свободный конец пружины остается неподвижным и на протяжении $t = 200$ s снова включается внешний привод со скоростью V_0 .

Для первого значения температуры T_1 для всех алканов поведение системы подобно описанному к рис. 3.4, b, c : stick-slip режим сменяет участок, где сила трения F релаксирует, после чего снова наблюдается SS режим. Следует отметить, что для смазки с самой большой длиной молекулы на зависимости $F(t)$ наблюдаются длительные кинетические участки до момента, когда смазка расплавится, представлена на вставке к панели c . Такое поведение наблюдалось экспериментально [8, 19].

С повышением температуры T на панелях a и b ситуация остается ана-

логичной, но уменьшается максимальное значение силы трения F и разность ΔF как и было описано выше к рис. 3.4. Поведение системы на рис. 3.6, *c* со смазкой, молекулы которой имеют наибольшую длину среди представленных демонстрируют иную зависимость. При таких начальных условиях смазка сразу становится жидкоподобной. После остановки внешнего привода ($t > 1200$ s) смазка затвердевает и на протяжении $t = 600$ s происходит релаксация силы трения F . При $t = 1800$ s свободный конец пружины начинает движение со скоростью $V_0 = 500$ nm/s, натяжение растёт, соответственно увеличивается сила трения, после чего смазка плавится. После плавления смазка остается жидкоподобной и в системе устанавливается режим жидкостного трения. Такое поведение на рисунке представлено пиком.

С дальнейшим увеличением температуры описанное поведение наблюдается и для более коротких молекул алканов (рис. 3.6, *b* при $T_3 = 270$ K). На панели *a* ситуация для всех трех температур подобна. Режим жидкостного трения для параметров $C_{20}H_{42}$ устанавливается при значении температуры близком к T_c . Для представлены температур, после плавления скорость блока V снижается ниже критической V_{c0} , поэтому смазка затвердевает. Этим объясняется устанавливающийся stick-slip режим. Из рис. 3.6 видно, что с повышением температуры высота пика до перехода системы в режим жидкостного трения уменьшается. Этот факт подтвержден экспериментально.

Изучение зависимости $F(t)$ для различных алканов при постепенном увеличении скорости сдвига внешнего привода представлено на рис. 3.7. Как и для предыдущего случая, в начале каждого участка выбираются начальные условия $\Delta X = 18$ μ m, $V = 10$ nm/s, $\varphi = 0.65$. На протяжении $t_s = 200$ s внешний привод неподвижен, после чего 300 s он движется со скоростью V_0 . При низких скоростях в системе устанавливается режим сухого трения. С повышением V_0 устанавливается stick-slip движение, где большему значению скорости отвечает большая частота фазовых переходов [8]. Несмотря на то,

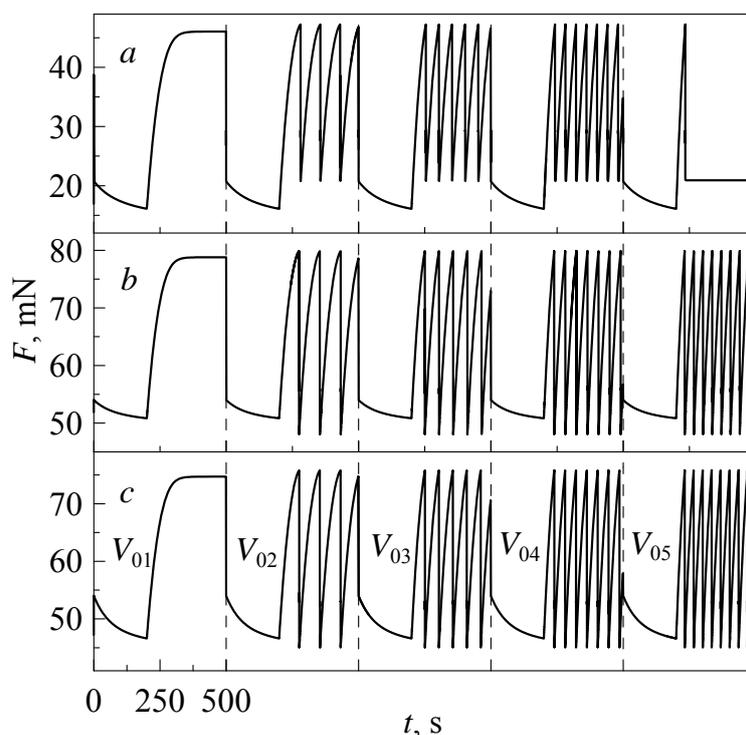


Рисунок 3.7 – Зависимость силы трения F (mN) от времени t (s) при постепенном увеличении скорости сдвига при параметрах рисунка 3.4, и начальным условиям $\Delta X = 18 \mu\text{m}$, $V = 10 \text{ nm/s}$, $\varphi = 0.65$, $T = 180 \text{ K}$. Панель a соответствует параметрам $T_k = 343 \text{ K}$, $\beta = 4.09$, панель b – $T_k = 642 \text{ K}$, $\beta = 3.68$, панель c – $T_k = 840 \text{ K}$, $\beta = 2.79$, $V_{01} - -V_{05} = 400, 500, 600, 700, 800 \text{ nm/s}$

что скорость $V_{04} > V_{c0} \approx 653 \text{ nm/s}$ больше критической, для всех трех смазок наблюдается прерывистое движение. После плавления скорость блока сначала увеличивается, а потом уменьшается ниже значения V_{c0} и смазка затвердевает, после чего снова увеличивается, таким образом устанавливается stick-slip режим.

При параметрах панели a и скорости $V_{05} = 800 \text{ nm/s}$, после плавления смазка остается жидкоподобной и устанавливается режим жидкостного трения. Для более длинных молекул такой переход происходит при еще больших скоростях. Такое поведение объясняется тем, что на панели a для V_{05} после плавления скорость блока остается больше критической V_{c0} , поэтому затвердевание не происходит. На двух других панелях не смотря на то, что $V_{05} > V_{c0} \approx 653 \text{ nm/s}$, пружина сжимается на столько, что скорость блока становится ниже V_{c0} , таким образом смазка затвердевает.

ВЫВОДЫ

В работе проводится дальнейшее развитие теоретической модели граничного трения, предложенной В.Л. Поповым и основанной на теории фазовых переходов Ландау. Модель позволяет представить наблюдаемый экспериментально прерывистый режим движения как периодические фазовые переходы первого рода между структурными состояниями ультратонкой пленки смазочного материала, зажатой между двумя твердыми поверхностями, обладающими наноразмерными неровностями, а также между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями. Выяснено, что в процессе трения неровных поверхностей смазка по площади трения представляет доменную структуру, где присутствуют жидкоподобные и твердоподобные участки, вносящие различный вклад в общую силу трения. Показано, что для шероховатых поверхностей зависимость силы трения от времени хотя и не является строго периодической, но близка к таковой, что совпадает с известными экспериментальными данными. Для получения результатов была применена параллельная архитектура CUDA, разработанная компанией NVIDIA и широко используемая в настоящее время для выполнения неграфических вычислений на большом количестве универсальных графических процессоров современных видеокарт. Поскольку данная технология является сравнительно новой, ранее нами рассматривалось поведение атомарно-гладких поверхностей бесконечного размера, где в каждой области поверхности смазка имеет одинаковые свойства. Выводы данной работы позволяют расширить и обобщить полученные ранее результаты для атомарно-гладких поверхностей.

Проведен учет пространственной неоднородности параметра порядка, для чего численно решается система уравнений в частных производных, используя явную разностную схему представления дифференциальных операторов. Показано, что в указанном случае смазка быстро релаксирует к од-

нородному состоянию, в котором параметр порядка принимает по плоскости контакта одинаковые значения. Зависимость силы трения от времени близка к строго периодической, что подтверждают многочисленные эксперименты.

Показано, что при низких температурах смазки при этом реализуется квазистатическая сила трения, позволяющая частично объяснить экспериментально наблюдаемые эффекты памяти. Построена зависимость силы трения от времени при длительной остановке внешнего привода и установлено, что переходы между режимами сухого, прерывистого и жидкостного трения происходит при превышении скоростью сдвига и температурой смазки определенных критических значений. Изучено поведение системы при различных площадях области контакта, что позволяет качественно установить характер влияния внешнего нагружения. Построены зависимости для параметров вязкости, соответствующих смазкам, состоящим из молекул высокомолекулярных алканов различной длины.

ПЕРЕЧЕНЬ ССЫЛОК

1. Israelachvili J. Adhesion forces between surfaces in liquids and condensable vapours // *Surface Science Reports*. – 1992. – Vol. 14, № 3. – P. 109-159.
2. Persson B.N.J. Sliding friction. Physical principles and applications. New York: Springer-Verlag, 2000. 515 p.
3. 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.
4. Reiter G., Demirel A. L., Peanasky J. Stick to slip transition and adhesion of lubricated surfaces in moving contact // *Journal of Chemical Physics*. – 1994. – Vol. 101, № 3. – P. 2606-2615.
5. Yamada S. Dynamic transitions in molecularly thin liquid films under frictional sliding / S. Yamada // *Langmuir*. – 2008. – Vol. 24, № 4. – P. 1469-1475.
6. Hardy W., Bircumshaw J. Bakerian Lecture. Boundary Lubrication. Plane Surfaces and the Limitations of Amontons' Law // *Proc. R. Soc. Lond. A*. 1925. Vol. 108. P. 1–27.
7. Попов В. Л. Термодинамика и кинетика плавления сдвигом тонкого слоя смазки, заключенного между твердыми телами // *Журнал технической физики*. – 2001. – Т. 71, № 5. – С. 100-110.
8. Yoshizawa H., Chen Y.-L., Israelachvili J. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 1. Relation between adhesion and friction // *Journal of Physical Chemistry*. – 1993. – Vol. 97, № 16. – P. 4128-4140; Yoshizawa H., Israelachvili J. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-slip

- friction of spherical and chain molecules // *Journal of Physical Chemistry*. – 1993. – Vol. 97, № 43. – P. 11300-11313.
9. Popov V. L. A Theory of the transition from static to kinetic friction in boundary lubrication layers / V. L. Popov // *Solid State Commun.* – 2000. – Vol. 115. – P. 369-373.
 10. Filippov A. E., Klafter J., Urbakh M. Friction through dynamical formation and rupture of molecular bonds // *Physical Review Letters*. – 2004. – Vol. 92, № 13. – P. 135503 (4).
 11. Ляшенко Я. А., Хоменко А. В., Метлов Л. С. Феноменологическая теория плавления тонкой пленки смазки между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями // *Журнал технической физики*. – 2010. – Т. 80, № 8. – С. 120-126.
 12. Ляшенко Я. А., Хоменко А. В., Метлов Л. С. Нелинейная термодинамическая модель граничного трения // *Трение и износ*. – 2011. – Т. 32, № 2, – С. 113-123.
 13. Braun O. M., Naumovets A. G. Nanotribology: Microscopic mechanisms of friction // *Surf. Sci. Rep.* – 2006. – Vol. 60. – P. 79-158.
 14. Sivebaek I. M. Velocity dependence of friction of confined hydrocarbons / I. M. Sivebaek, V. N. Samoilov, Bo N. J. Persson // *Langmuir*. – 2010. – Vol. 26, № 11. – P. 8721-8728.
 15. Robbins M.O., Müser M.H. Computer Simulations of Friction, Lubrication and Wear. In *Modern Tribology Handbook* / Edited by B. Bhushan. Boca Raton: CRC Press, 2001. P. 717–765; cond-mat/0001056.
 16. Хоменко О. В., Ляшенко Я. О. Фазова динаміка тонкої плівки мастила між твердими поверхнями при деформаційному дефекті модуля зсуву // *Журнал фізичних досліджень*. – 2007. – Т. 11, № 3. – С. 268-278.
 17. Хоменко О. В., Ляшенко Я. О., Борисюк В. М. Самоподібна фазова динаміка межового тертя // *Український фізичний журнал*. – 2009. – Т. 54,

- № 11. – С. 1142-1151.
18. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Ч. 1. – Москва, Наука, 1995. – 608 с.
 19. 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.
 20. Luengo G., Israelachvili J., Granick Generalized effects in confined fluids: new friction map for boundary lubrication // *Wear*. – 1996. – Vol. 200, № 1-2. – P. 719-731.
 21. 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.
 22. Ляшенко Я. А. Фазовый переход первого рода между жидкоподобной и твердоподобной структурами граничной смазки / Я. А. Ляшенко // *Журнал технической физики*. – 2012. – Т. 82, № 2. – С. 19-28.
 23. Попов В. Л. Термодинамическая модель кристаллических упругопластических сред // *Письма в ЖТФ*. – 1999. – Т. 25, № 20. – С. 31-38.
 24. Lyashenko I. A., Khomenko A. V., Metlov L. S. Thermodynamics and kinetics of boundary friction // *Tribology International*. – 2011. – Vol. 44. – P. 476-482.
 25. 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 p.).
 26. Ахматов А.С. Молекулярная физика граничного трения. М.: Физматгиз, 1963. 472 с.
 27. Ляшенко Я. А. Трибологические свойства режимов сухого, жидкостного и граничного трения / Я. А. Ляшенко // *Журнал технической физики*. – 2011. – Т. 81, № 5, – С. 115-121.

28. Ландау Л.Д. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода / Л. Д. Ландау, И. М. Халатников // ДАН СССР. – 1954. – Т. 96, №3. – С. 469-472.
29. Сандерс Д., Кэндрот Э. Технология CUDA в примерах. Введение в программирование графических процессоров: пер. с англ. Слинкина А.А., научный редактор Боресков А.В. М.: ДМК Пресс, 2011. 232 с.
30. Tartaglino U., Samoilov V.N., Persson B.N.J. Role of surface roughness in superlubricity // J. Phys.: Condens. Matter. 2006. Vol. 18. N 17. P. 4143–4160.
31. Bowden F.P., Tabor D. The friction and lubrication of solids. Oxford: The Clarendon Press, 1954. 337 p.
32. [Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P.] Numerical Recipes in C: the Art of Scientific Computing. New York: Cambridge University Press, 1992. 1020 p.
33. *Haken H.* Information and self-organization: A macroscopic approach to complex systems. - Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag, 2000. - P. 222.