

УДК 539.62:621.891

КП

№ держреєстрації 0116U006818

Інв. №

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Сумський державний університет (СумДУ)

40007, м. Суми, вул. Р.-Корсакова, 2: тел. (0542) 33-41-08, факс (0542) 33-40-49

ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи

д-р фіз.-мат. наук, проф.

\_\_\_\_\_ А.М. Чорноус

ЗВІТ

ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ

**Термодинамічна теорія фазових переходів між структурними станами  
межового мастила із урахуванням просторової неоднорідності  
МОДЕЛЮВАННЯ КІНЕТИЧНИХ ПРОЦЕСІВ, ЩО ПРОТІКАЮТЬ ПІД  
ЧАС ПЛАВЛЕННЯ/ТВЕРДНЕННЯ МАСТИЛА**

(проміжний)

Начальник НДЧ

канд.фіз.-мат.наук., с.н.с.

Д.І. Курбатов

Керівник НДР

д-р.фіз.-мат.наук, доцент

Я.О. Ляшенко

2017

Рукопис закінчено 26 грудня 2017 р.

Результати цієї роботи розглянуто на засіданні наукової ради СумДУ, протокол від 29.11.2017 № 2

## СПИСОК АВТОРІВ

Керівник НДР, старший науковий співробітник д-р.фіз.-мат.наук, доцент (26.12.2017)	Я.О. Ляшенко (реферат, вступ, розд. 1,2)
Відповідальний виконавець, Старший науковий співробітник, канд.фіз.-мат.наук, ст. викладач (26.12.2017)	А.М. Заскока (реферат, вступ, розд. 1,2)
Виконавці: Старший науковий співробітник канд.фіз.-мат.наук, ст. викладач (26.12.2017)	В.М. Борисюк (розд. 1)
Старший науковий співробітник канд.фіз.-мат.наук, ст. викладач. (26.12.2017)	У.С. Швець (розд. 1)
Аспірант Молодший науковий співробітник. (26.12.2017)	Ю.Ю. Волк (розд. 1)
Науковий співробітник Молодший науковий співробітник (26.12.2017)	Д.С. Трощенко (розд. 2)
Студент лаборант (26.12.2017)	О.В. Жихарева (підрозд. 1.1)
Студент лаборант (26.12.2017)	Є.В. Демченко (підрозд. 2.1)
Студент лаборант (26.12.2017)	М.А. Дейнека (підрозд. 2.1)

## РЕФЕРАТ

Звіт про НДР: 31 с., 9 рис., 24 джерела.

МЕЖОВЕ МАСТИЛО, ПАРАМЕТР ПОРЯДКУ, ПЕРЕРИВЧАСТИЙ РУХ, ТАНГЕНЦІЙНІ НАПРУЖЕННЯ ТА ДЕФОРМАЦІЇ, ТРИБОЛОГІЯ, ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ.

Об'єкт дослідження – процеси зсувного плавлення, що спостерігаються в тонких твердоподібних плівках мастила при межовому терті.

Метою проекту є подальший розвиток термодинамічної теорії, що описує зсувне плавлення. Опис кінетичних процесів, що відбуваються при плавленні нанорозмірних об'єктів. Також метою є пояснення механізму переривчастого режиму руху, коли сила внутрішнього тертя в трибологічній системі періодично змінюється із часом, у просторово неоднорідному випадку. Дослідження на основі побудованої теорії впливу зовнішніх факторів на процеси, що відбуваються при плавленні в режимі межового тертя.

Методи дослідження – в роботі використовувались методики дослідження фазових переходів.

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
1 Зв'язок між параметрами порядку надлишкового об'єму і модуляції густини.	7
1.1 Симетричний потенціал.....	7
1.2 Несиметричний потенціал.....	16
1.3 Фазови перехід другого роду .....	18
2 Вплив зовнішнього навантаження.....	21
2.1 Фазовий перехід другого роду .....	21
2.1 Фазовий перехід першого роду.....	25
ВИСНОВКИ.....	28
ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ.....	29

## ВСТУП

У багатьох технологічних додатках важливо розуміти процеси при зіткненні твердих частинок. Характеристики зіткнень визначають, наприклад, динаміку гранульованих середовищ [1-4]. До сьогодні пір багато питань залишаються невирішеними в цій галузі, оскільки точна динаміка зіткнення, у тому числі часткове ковзання, повне ковзання або відсутність проковзування в контактній зоні під час різних фаз впливу може бути дуже складною [5]. Класичну теорію для випадку без ковзання, тобто нескінченний коефіцієнт тертя, яка заснована лише на законах збереження та умовах прокочування, можна знайти в підручниках з механіки [6]. Проте, це питання спірне, оскільки тіло вважається еластичним, але одночасно використовується кінематичний стан жорсткого обертання тіла для сфери. Тангенціальний контакт, а також мікропроковзування у контактній зоні, вперше були описані в [5] (теорія MBF). Автори цієї роботи використали теорію для нормального контакту пружних сфер, запропоновану Герцем в 1882 р. [7], а також теорію Міндліна для відповідної проблеми дотичного контакту [8]. Пізніше Барбер запропонував аналітичний опис [9], але лише для фаз зіткнення без прослизання. Теорія MBF була експериментально підтверджена самими авторами [10], а пізніше іншими колективами [11-13]. Огляд існуючих моделей зіткнень та їх експериментальне підтвердження можна знайти в книзі [14].

В останніх роботах Попова та ін. показано, що теорію Герца-Міндліна можна точно відтворити заміною реального тривимірного контакту [15] на контакт між певним модифікованим простим профілем і лінійно пружною основою з незалежних пружин [16, 17]. Цей підхід отримав назву Метод редукції розмірності (MDR) і призводить до великого спрощення аналізу динамічних контактних задач. Таким чином, зіткнення пружних сфер без ковзання та адгезії були чітко проаналізовані в [18]. У подальших роботах [19, 20] були проведені узагальнення зіткнення з коефіцієнтом тертя, який має кінцеве значення, в зоні контакту (без зчеплення), а також з адгезійним зіткненням без ковзання.

У роботі розроблені два підходи до опису процесів межового тертя. В одному з них параметром порядку є періодична частина мікроскопічної функції густини середовища  $\varphi$  (модуляція щільності), значення якої зменшується з плавленням, до чого призводить зростання або температури  $T$ , або пружних деформацій  $\varepsilon_{el}$ . У другому підході як параметр порядку вибирається надлишковий об'єм  $f$ , який збільшується при плавленні з підвищенням температури і пружних деформацій.

Перевагою такого підходу є те, що він явно враховує вплив зовнішнього навантаження на поверхні тертя, яка вводиться через нормальні зовнішні напруження  $-n$ , що входять у вираз для першого інваріанта тензора деформацій. З ростом абсолютної величини  $n$  надлишковий об'єм  $f$  зменшується за рахунок здавлювання мастильного шару обмежувачими стінками. Причому в рамках другого підходу використовуються два типи розкладання: несиметричне і симетричне. У першому випадку описується фазовий перехід між двома ненульовими значеннями надлишкового об'єму  $f$ , а друга ситуація відповідає системам, в яких впорядкований твердоподібний стан мастильного матеріалу відповідає нульовому значенню надлишкового об'єму, який стає ненульовим при підвищенні температури за рахунок плавлення. В обох випадках переходи між фазовими станами мастила описані як фазові переходи першого роду.

Оскільки обидва підходи, хоча і оперують параметрами порядку, в які вкладається різний фізичний зміст, описують один і той же процес межового тертя, встановимо зв'язок між параметрами порядку  $\varphi$  і  $f$ . Однак, при цьому варто розуміти, що оскільки другий підхід більш загальний, він здатний описати ефекти, які описати в рамках першого підходу не можливо.

# 1 Зв'язок між параметрами порядку надлишкового об'єму і модуляції густини

## 1.1 Симетричний потенціал

Проаналізуємо в цьому підрозділі симетричне розкладання вільної енергії, яке записується у вигляді [21]

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{c}{2}(\nabla f)^2 + \phi_0 f^2 - \frac{1}{2}\phi_1 f^4 + \frac{1}{6}\phi_2 f^6, \quad (1.1)$$

де  $\Phi, \Phi_0, c, \phi_0, \phi_1, \phi_2$  параметри розкладання

$$\begin{aligned} \Phi_0 &= \Phi_0^* + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2, \\ \phi_0 &= \phi_0^* - \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha T. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Згідно з (1.1) пружні напруження, що виникають в мастилі, визначаються як

$$\sigma_{ij}^e = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f^2. \quad (1.3)$$

Вираз (1.3) у вигляді ефективного закону Гука прийме вигляд з ефективними пружними параметрами

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^e &= 2\mu_{eff} \varepsilon_{ij}^e + \lambda_{eff} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij}, \\ \mu_{eff} &= \mu - \bar{\mu} f^2, \\ \lambda_{eff} &= \lambda - \bar{\lambda} f^2 \end{aligned} \quad (1.3)$$

Які зменшуються з плавленням мастильного шару при зростанні параметра  $f$ .

Нескладно показати, що

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}},$$

$$\left(\varepsilon_{ij}^e\right)^2 = \frac{1}{2} \left[ \left(\frac{\tau}{\mu_{eff}}\right)^2 + \left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 \right], \quad (1.4)$$

де  $n$ ,  $\tau$  – нормальна і дотична компоненти напружень, що діють на мастильний матеріал зі сторони поверхонь, що труться. Напруження  $\tau$  визначаються залежністю [22]

$$\tau = \mu_{eff} \varepsilon_{el}. \quad (1.5)$$

Другий підхід базується на розкладанні вільної енергії в ряд за степенями параметра  $\varphi$ , який представляє собою амплітуду періодичної складової мікроскопічної функції густини ]:

$$\Phi = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{4}\varphi^4 + \frac{c}{6}\varphi^6 + \frac{g}{2}(\nabla\varphi)^2, \quad (1.6)$$

де  $T$  – температура мастила,  $T_c$  – критична температура,  $\varepsilon_{el}$  – зсувна компонента пружної деформації,  $\alpha$ ,  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $g$  – додатні сталі.

Визначимо пружні напруження як  $\sigma_{el} = \partial\Phi/\partial\varepsilon_{el}$ :

$$\sigma_{el} = a\varphi^2\varepsilon_{el}. \quad (1.7)$$

Таким чином з введенням в розкладання (1.4) коефіцієнта  $a$  модуль зсуву визначається виразом:

$$\mu = a\varphi^2. \quad (1.8)$$

Стаціонарні стани знайдемо з умови  $\partial\Phi/\partial\varphi = 0$ , отримуємо корені:

$$\varphi_{\mp}^2 = \frac{b}{2c} \mp \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{2c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha(T - T_c)}{c}\right)}, \quad (1.9)$$



які задають абсциси екстремумів потенціалу (1.6). Знак «-» відповідає максимумам потенціалу, а «+» - його мінімумам.

Для початку слід встановити відповідність між параметрами порядку  $\varphi$  і  $f$ , що можна легко зробити з порівняння виразів для зсувних напружень (1.5) і (1.7), що з урахуванням (1.3) дає зв'язок

$$f^2 = \frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a}{\bar{\mu}} \varphi^2 \quad (1.10)$$

Згідно (1.10), з ростом величини модуляції густини  $\varphi$  (упорядкуванням мастильного матеріалу) надлишковий об'єм  $f$  зменшується, на що було вказано раніше.

Причому максимальне значення надлишкового об'єму  $f_{\max} = \sqrt{\mu/\bar{\mu}}$  відповідає повністю разупорядкованому мастилу, для якого  $\varphi = 0$ . Максимальне значення параметра порядку  $\varphi$  легко визначити при  $f = 0$ , і воно складе  $\varphi_{\max} = \sqrt{\mu/a}$ .

З порівняння структур рівнянь (1.1) і (1.6) видно, що вони можуть бути зведені одне до іншого шляхом перетворення коефіцієнтів, якщо ми формально приймемо  $n = 0$ . При  $n = 0$  перший інваріант (1.4)  $\varepsilon_{ii}^e = 0$ , а другий інваріант з точністю до сталої зводиться до квадрату пружних зсувних деформацій:  $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \equiv \varepsilon_{el}^2/2$ . При цьому розкладання (1.1) (без урахування градієнтного доданка) запишеться в більш простому вигляді

$$\Phi = \Phi_0^* + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 + \left( \phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 - \alpha T \right) f^2 - \frac{1}{4} \phi_1 f^4 + \frac{1}{6} \phi_2 f^6. \quad (1.1)$$

Використовуючи зв'язок (1.10), запишемо вільну енергію (1.11) як функцію параметра порядку  $\varphi$ . Після підстановки і зведення подібних отримаємо вираз

$$\begin{aligned}
\Phi = & \left[ \Phi_0^* - \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1 \mu^2}{4\bar{\mu}^2} + \frac{\phi_2 \mu^3}{6\bar{\mu}^3} \right] + \\
& + \varphi^2 \left[ \frac{a}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha' T a}{\bar{\mu}} - \frac{a \phi_0^*}{\bar{\mu}} + \frac{a \phi_1 \mu}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu^2 a}{2\bar{\mu}^3} \right] - \\
& - \frac{\varphi^4}{2} \left[ \frac{\phi_1 a^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu a^2}{\bar{\mu}^3} \right] + \frac{\varphi^6}{3} \left[ -\frac{\phi_2 a^3}{2\bar{\mu}^3} \right].
\end{aligned} \tag{1.12}$$

В (1.12) в порівнянні з (1.6) з'явився перший доданок, що не залежить від параметра порядку  $\varphi$ , причому включає в себе температуру  $T$ . Проте, цей доданок впливає тільки на рівень відліку енергії, і не входить в еволюційні рівняння, від яких визначає кінетику процесу, тому таким доданком можна знехтувати. З зіставлення виразів (1.12) і (1.6) легко встановити відповідності між сталими розкладання:

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{\alpha' a}{\bar{\mu}}; \quad T_c = \frac{\phi_0^*}{\alpha'} - \frac{\phi_1 \mu}{2\bar{\mu}^2 \alpha'} + \frac{\phi_2 \mu^2}{2\bar{\mu}^2 \alpha'}; \\
b &= \frac{\phi_1 a^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu a^2}{\bar{\mu}^3}; \quad c = -\frac{\phi_2 a^3}{2\bar{\mu}^3}.
\end{aligned} \tag{1.13}$$

При використанні співвідношень (1.13) потенціал (1.12) в точності зводиться до виразу (1.6).

На рис. 1.1 показані залежності вільної енергії  $\Phi$  від параметрів порядку  $f$  і  $\varphi$ . Причому залежності розраховані як безпосередньо за формулою (1.11) (показані символами), так і з використанням виразу (1.12) (суцільні лінії). Ці криві збігаються, що підтверджує відповідність виразів (1.11) і (1.12). Однак, у зв'язку з тим, що параметри  $f$  і  $\varphi$  пов'язані співвідношенням (1.10), і з ростом параметра  $f$  величина  $\varphi$  зменшується, залежності  $\Phi(f)$  і  $\Phi(\varphi)$  мають різний вигляд. Так, потенціал  $\Phi(f)$  є симетричним відносно значення  $f = 0$ . У розглянутому підході від'ємні значення параметра  $f$  не мають фізичного змісту, проте оскільки спостерігаваною величиною є  $f^2$ , а потенціал симетричний, виключати від'ємні значення з розгляду при чисельному рішенні кінетичних рівнянь немає необхідності.

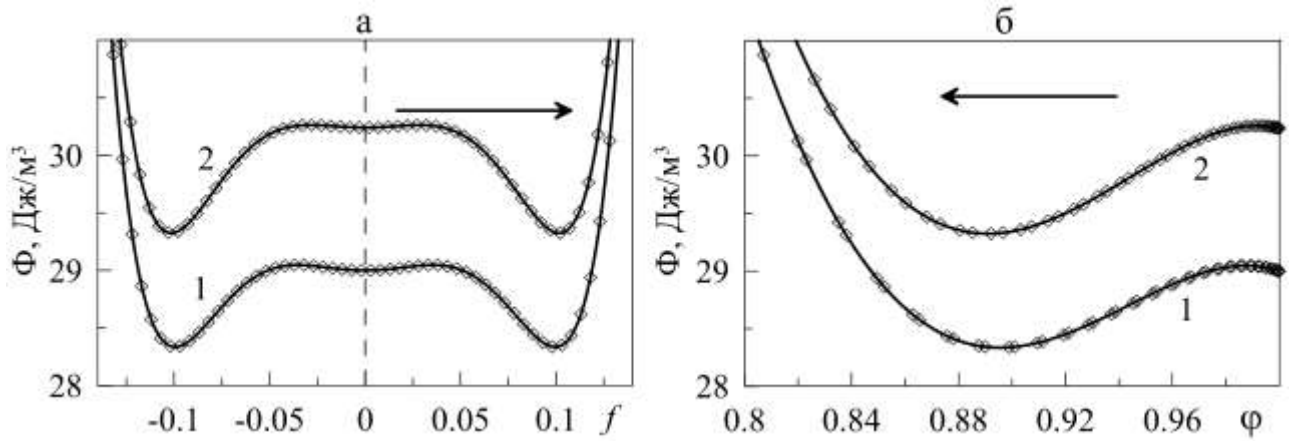


Рисунок 1.1 – Залежності вільної енергії  $\Phi$  від  $f$  (а) і  $\phi$  (б) при параметрах, зазначених у підрозділі  $\Phi_0^* = 20$  Дж/м³,  $\lambda = 10^{10}$  Па,  $\bar{\lambda} = 4 \cdot 10^9$  Па,  $\mu = 2 \cdot 10^{10}$  Па,  $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^{11}$  Па,  $\phi_0^* = 2960$  Дж/м³,  $\phi_1 = 145920$  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, температури  $T = 270$  К і  $a = 2 \cdot 10^{10}$  Па. Суцільні криві отримані при використанні виразу (1.12), символами показані залежності, розраховані за формулою (1.11). Криві 1 відповідають швидкості зсуву  $V = 300$  нм/с, криві 2 - значенням  $V = 320$  нм/с. Стрілками показано напрямок збільшення надлишкового об'єму  $f$ .

На рис. 1.1 б показані криві  $\Phi(\phi)$ , які відповідають кривим, наведеним на рис. 1.1 а. Тут потенціал відповідно до виразу (1.12) також є симетричним, однак показана лише гілка  $\phi > 0$ , яка має фізичний зміст. Крім того, з виразу (1.10) слідує, що як додатні, так і від'ємні значення параметра  $f$  можуть відповідати одному і тому ж додатньому значенню  $\phi$ .

Якщо для побудови кінетичних рівнянь використовувати вираз  $\Phi(f)$  (1.11), то необхідно мінімізувати енергію за параметром  $f$ , і в ході еволюції система прийде до стаціонарного стану, коли параметр порядку  $f$  буде відповідати одному з мінімумів  $\Phi(f)$ , показаних на рис. 1.1 а. Причому це буде стійкий стаціонарний стан, оскільки потенціал  $\Phi(f)$  стійкий. Проте, якщо використати вираз (1.12), для отримання аналогічних результатів необхідно вводити додаткові обмеження. Потенціал (1.12), як це видно на рис. 1.1 б, має лише один мінімум, який описує стійкий стаціонарний стан. Цей мінімум на залежності  $\Phi(\phi)$  відповідає ненульовому мінімуму  $\Phi(f)$ , який показаний на

рис. 1.1 а. Якщо початкові умови обирати в околі цього мінімуму, система покаже релаксацію до стаціонарного значення параметра порядку, яке відповідає вказаному мінімуму. Причому, як це видно з форми кривих на рис. 1.1 а та рис. 1.1 б, обидва підходи будуть описувати один і той же процес релаксації. Проте, нульового мінімуму на рис. 1.1 а та відповідного значенням енергії  $\Phi$  на рис. 1.1 б відповідає не мінімум потенціалу, а останній наведеній точці на залежності  $\Phi(\varphi)$ . Якщо додатково нічого не робити, то при чисельному розв'язанні кінетичних рівнянь параметр порядку  $\varphi$  продовжить своє зростання при досягненні зазначеного значення, оскільки коефіцієнт при  $\varphi^6$  в виразі (1.12) від'ємний, що приводить до виникнення нестійкості. З іншого боку, закінчення кривих на рис. 1.1 б відповідають нульовому надлишковому об'єму  $f$ , і максимально можливого значення модуляції густини  $\varphi_{\max} = \sqrt{\mu/a}$  (див. вираз (1.10)). Тому, при використанні потенціалу (1.12) з параметрами (1.13), ми при чисельному моделюванні введемо додаткову умову: якщо  $\varphi > \mu/a$ , то  $\varphi = \mu/a$ . При використанні такої умови значення параметра порядку  $\varphi$  ніколи не перевищить максимально допустимі. При використанні потенціалу (1.11) врахування подібної умови не потрібно, оскільки нульовий мінімум потенціалу згідно з структурою рівнянь є стійким, що також видно за формою кривих на рис. 1.1 а.

Розглянемо більш докладно причину виникнення описаної вище нестійкості потенціалу  $\Phi(\varphi)$ . Для цього проаналізуємо стаціонарні стани, що описуються потенціалами  $\Phi(f)$  (1.11) (рис. 1.2 а та 1.2 б) і  $\Phi(\varphi)$  (1.6) (рис. 1.2 в і 1.2 г). На рис. 1.2 а показана залежність стаціонарного значення параметра порядку  $f$  від температури мастильного матеріалу  $T$  при фіксованій швидкості зсуву  $V$  для потенціалу  $\Phi(f)$  (1.11), а на рис. 1.2 б - відповідна залежність ефективного модуля зсуву мастильного матеріалу  $\mu_{\text{eff}}$  (1.3). На рис. 1.2 в і рис. 1.2 г показані аналогічні залежності для потенціалу  $\Phi(\varphi)$  (1.6)}. Із вказаних рисунків слідує, що потенціали (1.11) і (1.6) описують системи, поведінка яких відрізняється при підвищенні температури  $T$ .

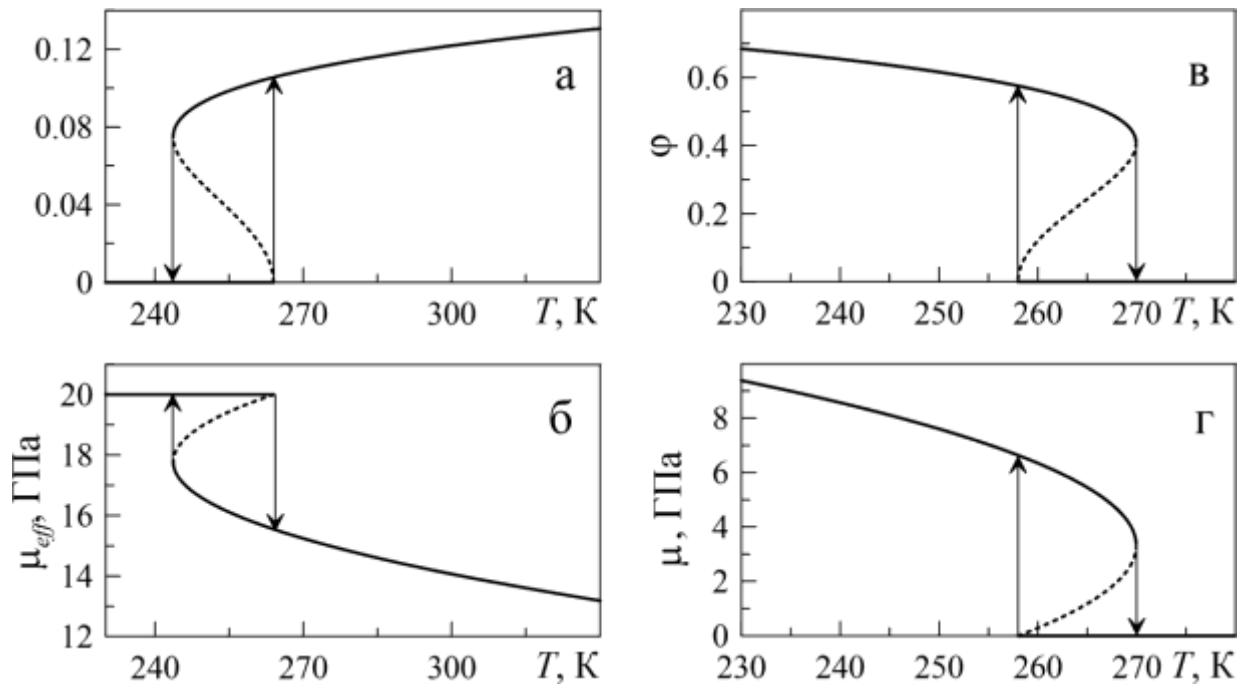


Рисунок 1.2 – (а) стаціонарні значення параметра порядку  $f$ , що відповідають потенціалу  $\Phi(f)$  (1.11) при параметрах рис. 1.1 і  $V = 400$  нм/с; (б) стаціонарні значення ефективного модуля зсуву  $\mu_{eff}$  (1.3), що відповідають рис. 1.2 а; (в) стаціонарні значення параметра порядку  $\varphi$  (1.9), що відповідають потенціалу  $\Phi(\varphi)$  (1.6) при параметрах рис. 1.1 і  $V = 400$  нм/с; (г) стаціонарні значення модуля зсуву  $\mu = a\varphi^2$  (1.8), що відповідають рис. 1.2 в.

Так, потенціал  $\Phi(f)$  (1.11) описує ситуацію, коли твердоподібний стан мастильного матеріалу характеризується сталим значенням модуля зсуву  $\mu_{eff}$ , який стрибкоподібно зменшується з підвищенням температури до точки фазового переходу, після чого в рідиноподібному стані мастила модуль зсуву монотонно зменшується. Потенціал  $\Phi(\varphi)$  (1.6) описує іншу ситуацію, в якій модуль зсуву монотонно зменшуються в твердоподібному стані, а після фазового переходу плавлення він дорівнює нулю. У першому випадку (рис. 1.2 а і 1.2 б) здійснюється перехід між «ідеальним» кристалом і рідиноподібною структурою, має ознаки твердого тіла (ненульовий модуль зсуву, який з подальшим підвищенням температури зменшується і стає нульовим). У другому випадку (рис. 1.2 в і 1.2 г) твердоподібна структура мастила має дефекти, кількість яких зростає з підвищенням температури,

оскільки модуль зсуву зменшується, а після плавлення мастильний шар стає «ідеальною» рідиною, оскільки в розплавленому стані модуль зсуву  $\mu = 0$ . Таким чином, потенціал  $\Phi(f)$  (1.11) описує перехід між «ідеальним» кристалом і в'язко-пружної мастилом, а вираз  $\Phi(\varphi)$  (1.6) - перехід між в'язко-пружної мастилом і «ідеальною» рідиною.

Незважаючи на наведене вище пояснення, той факт, що потенціал (1.12) є нестійким, може бути сприйнятий як певне протиріччя. Цей потенціал відповідає симетричному розкладанню (1.11), яке описує фазовий перехід першого роду між нульовим і ненульовим значеннями надлишкового об'єму  $f$ . Раніше було показано, що симетричний і несиметричний потенціали якісно дають схожі результати. Це дозволяє говорити про те, що потенціал типу (1.12), що містить третій інваріант, описує аналогічну поведінку з розглянутим випадком симетричного розкладання, як це було також показано в експериментальній роботі [23]. За аналогією з рівнянням (1.11) шукане несиметричне розкладання вільної енергії  $\Phi(f)$  запишеться у вигляді

$$\Phi = \Phi_0^* + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 + \left( \phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 - \alpha' T \right) f^2 - \frac{1}{3} \phi_1 f^3 + \frac{1}{4} \phi_2 f^4, \quad (1.14)$$

Яке дає записаний вище зв'язок між параметрами порядку (1.10). Підстановка (1.10) у вираз (1.14) дає еквівалентний потенціал  $\Phi(\varphi)$  у вигляді

$$\Phi = \left[ \Phi_0^* - \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_2 \mu^3}{6 \bar{\mu}^3} \right] - \varphi^2 \frac{a}{\bar{\mu}} \left[ \phi_0^* - \frac{\bar{\mu} \varepsilon_{el}^2}{2} - \alpha' T + \frac{\phi_2 \mu}{2 \bar{\mu}} \right] - \frac{\phi_1}{3} \left( \frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a \varphi^2}{\bar{\mu}} \right)^{3/2} + \frac{\varphi^4}{4} \left[ \frac{\phi_2 a^2}{\bar{\mu}^2} \right], \quad (1.15)$$

який відповідно до математичної структури є стійким, оскільки коефіцієнт розкладання при найвищій степені  $\varphi^4$  додатний. Варто відмітити, що потенціал (1.15) містить нецілі степені параметра порядку, однак з використанням розкладання третього доданка в ряд

$$\left(\frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a\varphi^2}{\bar{\mu}}\right)^{3/2} = \left(\frac{\mu}{\bar{\mu}}\right)^{3/2} - \frac{3}{2} \frac{(\mu/\bar{\mu})^{3/2} a}{\mu} \varphi^2 + \frac{3}{8} \frac{(\mu/\bar{\mu})^{3/2} a^2}{\mu^2} \varphi^4 + O(\varphi^6). \quad (1.16)$$

зводиться до поліноміальний вигляду, зберігаючи при цьому стійку форму, оскільки всі складові вищих порядків в (1.16) додатні.

На рис. 1.3 показані стаціонарні значення параметрів порядку  $f$  і  $\varphi$ , а також модуля зсуву  $\mu$  як функції температури  $T$ , що відповідають потенціалам (1.14) і (1.15). Якісно ситуація, що показана на рисунку, повторює раніше розглянутий випадок, проілюстрований на рис. 1.2 а і рис. 1.2 б, а саме, з ростом температури  $T$  модуль зсуву  $\mu$  до точки плавлення  $T = T_{c0}$  не змінюється, після чого стрибкоподібно зменшується при фазовому переході першого роду, і продовжує подальше зменшення при подальшому зростанні температури. Відмінність тут в тому, що потенціал  $\Phi(\varphi)$  (1.15) на відміну від виразу (1.12) є стійким. Проте, в обох випадках при обраних параметрах розкладання значення  $\varphi > 1$  не мають фізичного змісту, оскільки  $\varphi = 1$  є максимально можливим значенням параметра порядку.

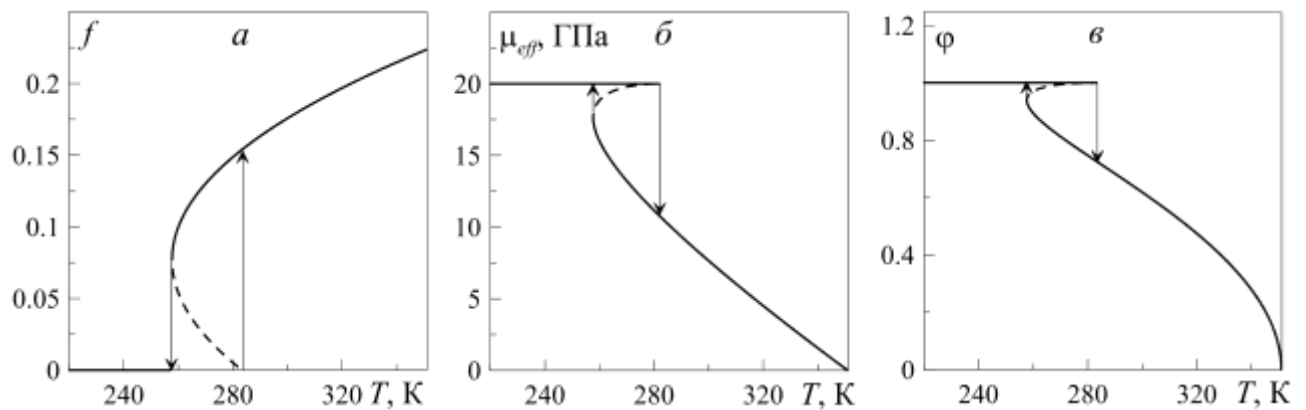


Рисунок 1.3 – (а) стаціонарні значення параметра порядку  $f$ , що відповідають потенціалу  $\Phi(f)$  (1.14) при параметрах рис. 1.2 і  $\phi_0^* = 1700$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\phi_1 = 8000$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\phi_2 = 52000$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\phi_3 = 1293750$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\alpha = 6$  Дж·К<sup>-1</sup>/м<sup>3</sup>,  $V = 0$  нм/с; (б) стаціонарні значення модуля зсуву  $\mu_{eff}$  (1.3), що відповідають рис. 1.3 а; (в) стаціонарні значення параметра порядку  $\varphi$ , що відповідають потенціалу  $\Phi(\varphi)$  (1.15) при параметрах рис. 1.3 а і  $a = 2 \cdot 10^{10}$  Па.

На рис. 1.4 показані криві потенціалів (1.14) і (1.15) як функції відповідних параметрів порядку для трьох значень температур.

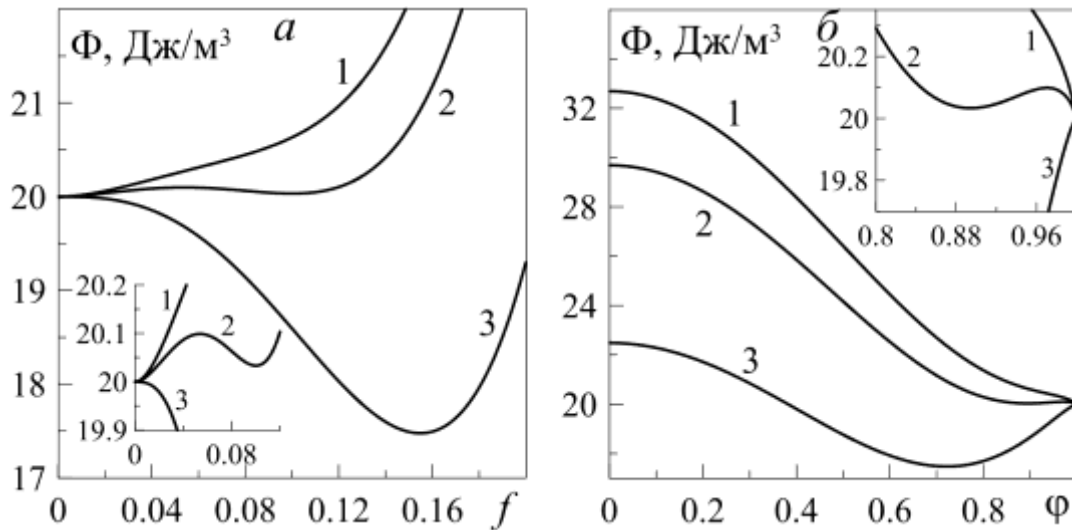


Рисунок 1.4 – (а) потенціал  $\Phi(f)$  (1.14) при параметрах рис. 1.3; (б) потенціал  $\Phi(\varphi)$  (1.15) при параметрах рис. 1.3. Криві 1-3 на обох рисунках відповідають температурам  $T = 250, 260, 284$  К і швидкості зсуву  $V_0 = 0$  нм/с.

Криві 1 відповідають твердоподібному стану мастильного матеріалу ( $T < T_c^0$ ), криві 2 побудовані для температури  $T$ , при якій реалізується область гістерезиса ( $T_c^0 < T < T_{c0}$ ), і криві 3 ілюструють ситуацію, коли мастильний матеріал рідиноподібний ( $T > T_{c0}$ ), але модуль зсуву при цьому ненульовий. Параметри рисунка подібні до тих, при яких побудований рис. 1.3, тому між ними може бути зроблене однозначну відповідність.

## 1.2 Несиметричний потенціал

Проведемо аналіз, аналогічний представленому в попередньому підрозділі, для несиметричного потенціалу  $\Phi(f)$  (1.1). У цьому випадку зв'язок між параметрами порядку  $f$  і  $\varphi$  запишеться у вигляді (пор. з (1.10))

$$f = \frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a}{\bar{\mu}} \varphi^2, \quad (1.17)$$



А термодинамічний потенціал (1.1) при  $n = 0$  прийме форму

$$\Phi = \Phi_0^* + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 - \left( \phi_0^* + \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 + \alpha'T \right) f + \frac{1}{2} \phi_1 f^2 - \frac{1}{3} \phi_2 f^3 + \frac{1}{4} \phi_3 f^4. \quad (1.18)$$

Для отримання потенціалу  $\Phi(\varphi)$ , еквівалентного до виразу  $\Phi(f)$  (1.18), необхідно зробити підстановку виразу (1.17) в енергію (1.18). Після зведення подібних отримаємо потенціал  $\Phi$  як функцію модуляції густини  $\varphi$  у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi = & \left[ \Phi_0^* - \frac{\alpha'T\mu}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_0^*\mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1\mu^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2\mu^3}{3\bar{\mu}^3} + \frac{\phi_3\mu^4}{4\bar{\mu}^4} \right] + \\ & + \varphi^2 \left[ \frac{a}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha'Ta}{\bar{\mu}} + \frac{a\phi_0^*}{\bar{\mu}} - \frac{a\phi_1\mu}{\bar{\mu}^2} + \frac{\phi_2\mu^2 a}{\bar{\mu}^3} - \frac{\phi_3\mu^3 a}{\bar{\mu}^4} \right] + \\ & + \varphi^4 \left[ \frac{\phi_1 a^2}{2\bar{\mu}^2} - \frac{\phi_2 \mu a^2}{\bar{\mu}^3} + \frac{3\phi_3 \mu^2 a^2}{2\bar{\mu}^4} \right] - \\ & - \varphi^6 \left[ -\frac{\phi_2 a^3}{3\bar{\mu}^3} + \frac{\phi_3 \mu a^3}{\bar{\mu}^4} \right] + \varphi^8 \left[ \frac{\phi_3 a^4}{4\bar{\mu}^4} \right]. \end{aligned} \quad (1.19)$$

На рис. 1.5 показані криві, розраховані за формулами (1.17)-(1.19). Видно, що потенціали  $\Phi(f)$  і  $\Phi(\varphi)$  є стійкими. Це пов'язано з тим, що в даному випадку описується ситуація, коли відбуваються переходи між двома структурними станами мастильного матеріалу, яким відповідають ненульові значення параметрів порядку  $f$  і  $\varphi$  (і, відповідно, модулів зсуву). Такий випадок може бути описаний аналогічним чином як при використанні в якості параметра порядку надлишкового об'єму  $f$ , так і модуляції густини  $\varphi$ . Єдина відмінність тут в тому, що потенціал (1.18) несиметричний, а еквівалентний йому потенціал (1.19) вже симетричний, оскільки параметри порядку пов'язані нелінійним співвідношенням (1.17). Проте, оскільки в обох випадках від'ємні значення параметрів порядку не мають фізичного змісту, це не порушує математичної структури рівнянь при переході від одного опису до іншого, і вони повністю еквівалентні. Ще раз відзначимо, що в даному випадку обидва потенціалу стійкі, оскільки описують одну і ту ж ситуацію фазового переходу першого

роду між двома станами з ненульовими значеннями модуля зсуву, і введення додаткових умов, як в підрозділі 1.1, тут не потрібно.

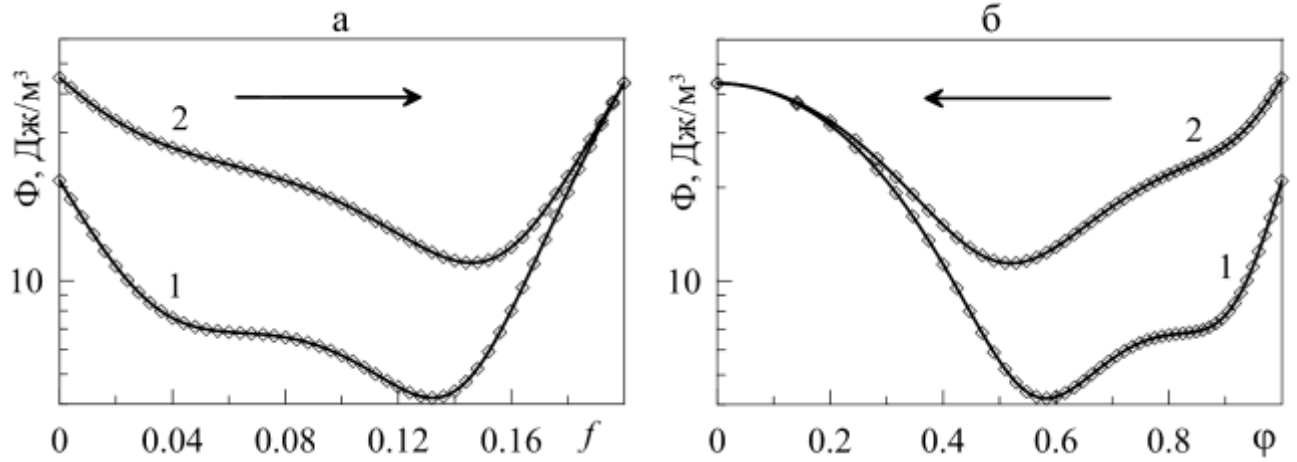


Рисунок 1.5 – Залежності вільної енергії  $\Phi$  від  $f$  (а) і  $\varphi$  (б) при параметрах, зазначених у підрозділі  $\Phi_0^* = 20$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\lambda = 10^{10}$  Па,  $\bar{\lambda} = 10^9$  Па,  $\mu = 2 \cdot 10^{10}$  Па,  $\bar{\mu} = 10^{11}$  Па,  $\phi_0^* = 25$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\phi_1 = 27500$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\phi_2 = 337500$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\phi_3 = 1293750$  Дж/м<sup>3</sup>,  $\alpha = 2.4$  Дж·К<sup>-1</sup>/м<sup>3</sup>,  $h = 10^{-9}$  м,  $\tau_f = 1$  Па·с,  $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$  с,  $n = -7 \cdot 10^5$  Па, температурі  $T = 290$  К і  $a = 2 \cdot 10^{10}$  Па. Суцільні криві отримані при використанні виразу (1.18), символами показані залежності, розраховані за формулою (1.19). Криві 1 відповідають швидкості зсуву  $V = 100$  нм/с, криві 2 значенням  $V = 500$  нм/с.

### 1.3 Фазові перехід другого роду

Раніше вказувалося, що вплив навантаження на поверхні тертя при використанні потенціалу  $\Phi(\varphi)$  типу (1.6) може бути враховано при варіації коефіцієнтів розкладання. Визначимо тут, яким чином їх слід при цьому варіювати. Для початку розглянемо фазовий перехід другого роду. В цьому випадку можна використовувати конструкцію виду (пор. з (1.1))

$$\Phi = \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 + \left( \phi_0^* - \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} (\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha' T \right) f^2 + \frac{1}{4} \phi_1 f^4, \quad (1.20)$$

де коефіцієнт при  $f^2$  змінює знак на від'ємний з підвищенням температури або пружних деформацій, що призводить до плавлення, оскільки стаціонарне значення параметра порядку  $f$  стає при цьому ненульовим.

Розглянемо спочатку спрощений випадок  $n = 0$ , в якому потенціал (1.20) зводиться до виразу

$$\Phi = \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 + \left( \phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 - \alpha T \right) f^2 + \frac{1}{4} \phi_1 f^4. \quad (1.21)$$

У випадку, описуваному потенціалом (1.21), ефективний модуль зсуву  $\mu_{eff}$  визначається формулою (1.3), що дає зв'язок між параметрами порядку у вигляді (1.10), і призводить до еквівалентного потенціалу  $\Phi(\varphi)$  у вигляді

$$\Phi = \left[ \frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} - \frac{\alpha T \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1 \mu^2}{4 \bar{\mu}^2} \right] + \varphi^2 \left[ \frac{a}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{\alpha T a}{\bar{\mu}} + \frac{a \phi_0^*}{\bar{\mu}} - \frac{a \phi_1 \mu}{2 \bar{\mu}^2} \right] + \varphi^4 \left[ \frac{\phi_1 a^2}{4 \bar{\mu}^2} \right]. \quad (1.22)$$

Залежності  $\Phi(f)$  (1.21) і  $\Phi(\varphi)$  (1.22) показані на рис. 1.6.

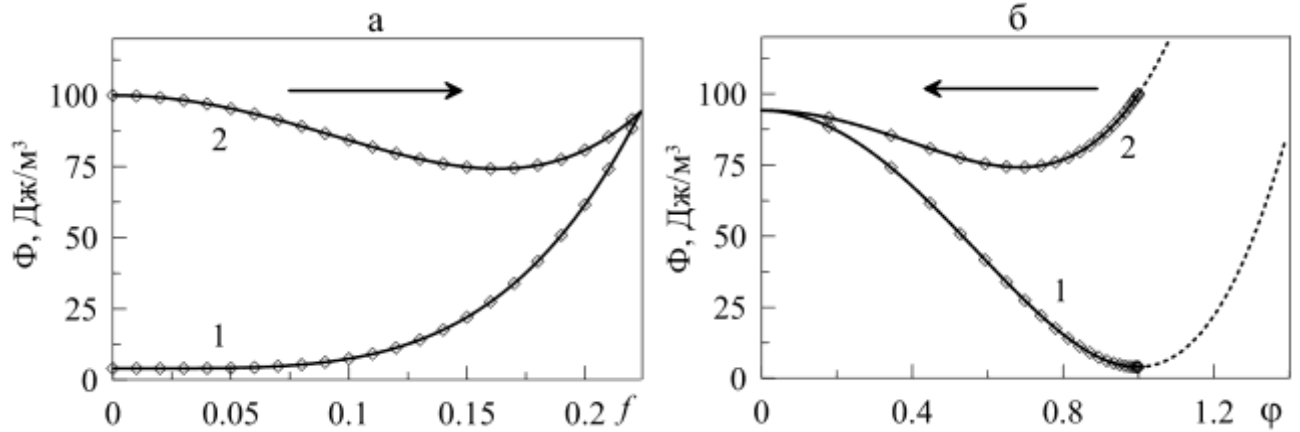


Рисунок 1.6 – Залежності вільної енергії  $\Phi$  від  $f$  (а) і  $\varphi$  (б) при параметрах,  $\Phi_0^* = 20$  Дж/м³,  $\lambda = 10^{10}$  Па,  $\bar{\lambda} = 4 \cdot 10^9$  Па,  $\mu = 2 \cdot 10^{10}$  Па,  $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^{11}$  Па,  $\phi_0^* = 2960$  Дж/м³,  $\phi_1 = 145920$  Дж/м³,  $\phi_2 = 13107200$  Дж/м³,  $\alpha = 10$  Дж·К<sup>-1</sup>/м³,  $h = 10^{-9}$  м,  $\tau_f = 1$  Па·с,  $\tau_\varepsilon = 10^{-7}$  с,  $n = -7 \cdot 10^5$  Па та температурі  $T = 290$  К і  $a = 2 \cdot 10^{10}$  Па. Суцільні криві отримані при використанні виразу (1.21), символами показані залежності, розраховані за формулою (1.22). Криві 1 відповідають швидкості зсуву  $V = 200$  нм/с, криві 2 значенням  $V = 1000$  нм/с.

На рис. 1.6 б пунктирними лініями показані продовження гілок потенціалу  $\Phi(\varphi)$  в області  $\varphi > \sqrt{\mu/a}$ , в якій згідно з (1.10) квадрат надлишкового об'єму  $f^2 < 0$ , що не має фізичного змісту. Рис.1.6 ілюструє безперервний фазовий перехід другого роду між станами зі значеннями  $f = 0$  і  $f > 0$ . У той час як на залежності на рис. 1.6 а реалізується нульовий мінімум потенціалу, на рис. 1.6 б згідно зі зв'язком (1.10) встановлюється стаціонарне значення  $\varphi = \sqrt{\mu/a}$ . Це значення є стійким, оскільки, як це видно з рисунка, відповідає мінімуму потенціалу. В даному випадку обидва подання вільної енергії  $\Phi$  є стійкими, і не виникає необхідності введення додаткової обмежуючої умови, як у підрозділі 1.1. Стаціонарні значення при цьому будуть схожі за формою з наведеними на рис. 1.2, з тією відмінністю, що гістерезис на залежностях замінить безперервний перехід.

## 2 Вплив зовнішнього навантаження

### 2.1 Фазовий перехід другого роду

Про Розглянемо на прикладі потенціалу (1.20) перехід від параметра порядку  $f$  до параметру порядку  $\varphi$  у випадку, коли зовнішні нормальні навантаження  $n$  не дорівнюють нулю. Причому будемо шукати потенціал  $\Phi(\varphi)$ , що відповідає виразу (1.20), у вигляді степеневого ряду. У розкладання (1.20) входить квадрат першого інваріанта (1.4), який в даному випадку може бути представлений у вигляді степеневого ряду

$$\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 = \left(\frac{n}{\lambda_{\text{eff}} + \mu_{\text{eff}}}\right)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} \sum_{\tilde{k}=0}^{\infty} (\tilde{k} + 1) \left(\frac{\bar{\lambda} + \bar{\mu}}{\lambda + \mu}\right)^{\tilde{k}} f^{2\tilde{k}}. \quad (2.1)$$

Точність опису функції  $\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2$  за допомогою ряду (2.1) підвищується з кількістю використаних в цьому ряді доданків, і на границі  $\tilde{k} \rightarrow \infty$  функція описується за допомогою ряду точно. Однак, початкове розкладання (1.20) містить максимальний степінь  $f^4$ , тому для відповідності математичних конструкцій потенціалів зупинимося на другому степені, що відповідає значенням  $\tilde{k} = 0, \tilde{k} = 1$ . При цьому ряд (2.1) дасть функцію

$$\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} + \frac{2n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda + \mu)^3} f^2 + O(f^4). \quad (2.2)$$

Другий інваріант (1.14) з точністю до сталого множника зводиться до суми першого інваріанта і квадрата пружної зсувної деформації. Тому (2.2) - єдина необхідна апроксимація, при використанні якої можна записати степеневе розкладання вільної енергії. Перед тим, як отримати таке розкладання, визначимо область застосовності апроксимації (2.2). На рис. 2.1 суцільною лінією показана залежність, розрахована безпосередньо за формулою (1.4), а штриховою - степенева апроксимація (2.2).

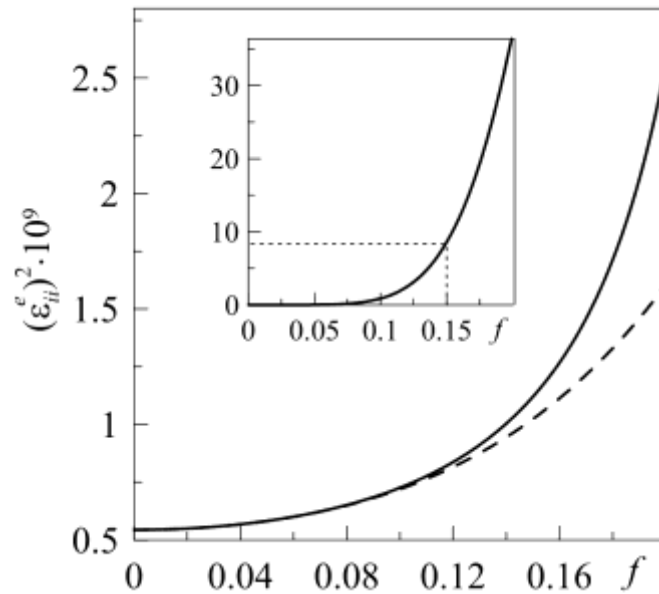


Рисунок 2.1 – Залежність квадрата першого інваріанта (1.4) (суцільна крива) і апроксимація (2.2) без урахування  $O(f^4)$  при параметрах, наведених на рис. 1.6. На вставці показано відхилення залежностей, виражене у відсотках, де за 100 \% береться значення, яке визначається формулою (1.4).

З вставки до рисунка слідує, що степенева апроксимація (2.2) з високою точністю описує функцію (1.4) в області  $f < 0.1$ , і цього більш ніж достатньо для опису фазового переходу другого роду. В області  $f < 0.15$  апроксимація показує помилку менш 9 %. Цієї області також достатньо і для опису фазового переходу першого роду. Більш того, при необхідності завжди можна домогтися як завгодно високої точності, враховуючи в (2.1) доданки більш високих порядків.

Підстановка виразу (2.2) в потенціал (1.20)

$$\Phi = \frac{\mu}{2} \epsilon_{el}^2 + \frac{n^2}{2(\lambda + \mu)} + f^2 \left[ \phi_0^* - \alpha T - \frac{\bar{\mu}}{2} \epsilon_{el}^2 + \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{2(\lambda + \mu)^2} \right] + f^4 \left[ \frac{\phi_1}{4} - \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})^2}{(\lambda + \mu)^3} \right], \quad (2.3)$$

яка згідно рис. 2.1 з високою точністю описує початковий потенціал (1.20) в області значень параметра порядку  $f < 0.1$ , тобто поблизу точки фазового переходу другого роду. Цією областю досить для опису переривчастого режиму

руху, який може існувати, як це показано в роботі [24], і в разі фазового переходу другого роду. Перейдемо тепер від параметра порядку надлишкового об'єму  $f$  до модуляції густини  $\varphi$ . Після підстановки зв'язку (1.10) у вираз (2.3), отримаємо вільну енергію як функцію параметра порядку  $\varphi$  у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi = & \left[ \frac{n^2 \lambda}{2(\lambda + \mu)^2} + \frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1 \mu^2}{4\bar{\mu}^2} + \frac{n^2 \lambda \mu}{(\lambda + \mu)^3} + \frac{n^2 \lambda \bar{\lambda} \mu}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} - \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} - \right. \\ & \left. - \frac{n^2 \bar{\lambda} \mu}{2(\lambda + \mu)^2 \bar{\mu}} - \frac{n^2 \bar{\lambda} \mu^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} - \frac{n^2 \bar{\lambda}^2 \mu^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}^2} \right] + \\ & + \varphi^2 \left[ \frac{a}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2 a}{2(\lambda + \mu)^2} - \frac{n^2 \lambda \bar{\lambda} a}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} - \frac{\phi_0^* a}{\bar{\mu}} + \frac{n^2 \mu a}{(\lambda + \mu)^3} - \frac{n^2 \lambda a}{(\lambda + \mu)^3} + \right. \\ & \left. + \frac{n^2 \bar{\lambda} a}{2(\lambda + \mu)^2 \bar{\mu}} + \frac{3n^2 \mu \bar{\lambda} a}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} + \frac{2n^2 \mu \bar{\lambda}^2 a}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}^2} + \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1 \mu a}{2\bar{\mu}^2} \right] + \\ & + \varphi^4 \left[ \frac{\phi_1 a^2}{4\bar{\mu}^2} - \frac{n^2 a^2}{(\lambda + \mu)^3} - \frac{n^2 \bar{\lambda}^2 a^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}^2} - \frac{2n^2 \bar{\lambda} a^2}{(\lambda + \mu)^3 \bar{\mu}} \right], \end{aligned} \quad (1.1)$$

яка при  $n = 0$  зводиться до потенціалу (1.22). Незважаючи на те, що потенціал (2.4) візуально має складний вигляд, при фіксованих сталих розкладання від виразу (1.22) він відрізняється лише тим, що за будь-якої степеня розкладання додатково з'являється доданок, пропорційний квадрату нормальних напружень  $n^2$ , величина яких задає зовнішній тиск.

На рис. 2.2 суцільними лініями показані залежності вільної енергії  $\Phi(f)$  і  $\Phi(\varphi)$ , розраховані з використанням точного виразу (1.20), а символами - ті ж залежності, які відповідають апроксимаціям (2.4) і (2.3). З рисунка слідує, що в області фазового переходу запропоновані апроксимації задовільно описують перехід плавлення, наслідком якого в динамічній системі є встановлення переривчастого режиму руху поверхонь, що труться. Це в черговий раз показує, що вплив тиску на поверхні тертя може бути враховано при відповідній модифікації сталих розкладання в потенціалі  $\Phi(\varphi)$  (1.6).

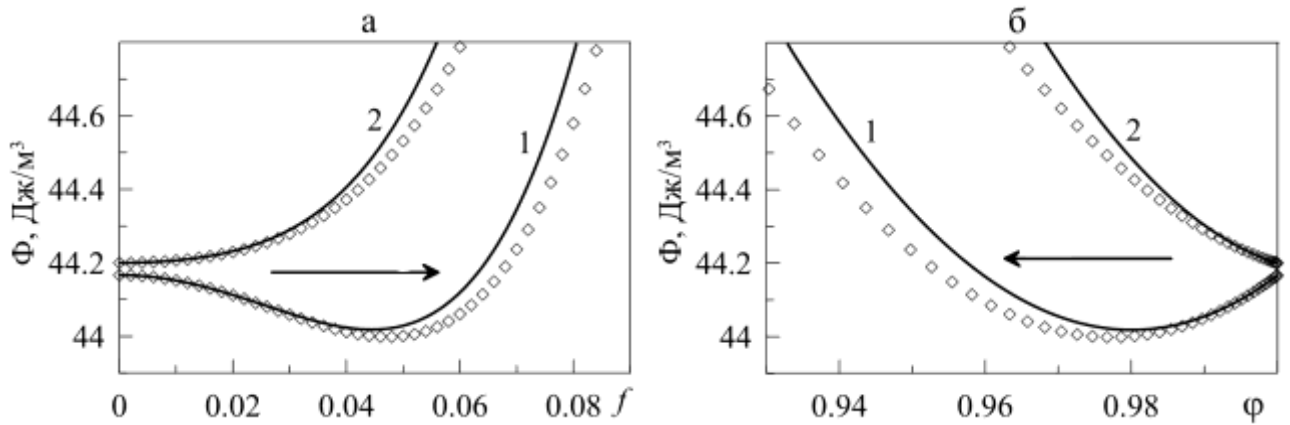


Рисунок 2.2 – Залежності вільної енергії  $\Phi$  від  $f$  (а) і від  $\phi$  (б) при параметрах рис. 1.6 і  $T = 250$  К,  $V = 600$  нм/с. Суцільні криві відповідають виразу (1.20), показані символами - виразу (2.4). Для кривих 1 напруження  $n = -7 \cdot 10^5$  Па, для кривих 2 -  $n = -1,2 \cdot 10^6$  Па. Криві під номером 2 на обох рисунках зміщені вниз на величину  $15.8 \text{ Дж/м}^3$ .

Хоча, помилка, яку вносить використання виразу (2.2), істотно зростає зі збільшенням параметра порядку  $f$ , тому в загальному випадку при віддаленні від точки фазового переходу двох доданків в (2.2) недостатньо. З іншого боку, крива 1 на рис. 2.2 показує гарну збіжність істинного виразу для вільної енергії з його апроксимацією. Ця крива побудована при малих значеннях зовнішнього тиску. Тому, в діапазоні малих значень навантажень на контактуючі поверхні потенціал типу (1.6) описує процеси, що відбуваються при межевому терті, досить точно. При зростанні зовнішнього навантаження можна використовувати вираз типу (2.4), проте з його збільшенням похибка такого опису буде збільшуватися, оскільки з ростом тиску коефіцієнти розкладання в (2.4) стають залежні від квадрата напружень  $n^2$  нелінійно, що згідно з (2.1) призводить до появи в (2.4) більш високих степенів розкладання. Однак, в будь-якому випадку поведінку системи можна однаково описати як при використанні в якості параметра порядку модуляції густини  $\phi$ , так і надлишкового об'єму  $f$ , оскільки згідно із співвідношенням (1.10) вони однозначно переходять один в інший.



## 2.1 Фазовий перехід першого роду

Розглянемо потенціал (1.1), згідно з яким зв'язок між параметрами порядку  $f$  і  $\varphi$  задається виразом (1.17). При цьому перший інваріант (1.4) з урахуванням (1.3) запишеться у вигляді степеневого ряду (пор. з (2.1))

$$\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 = \left(\frac{n}{\lambda_{\text{eff}} + \mu_{\text{eff}}}\right)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} \sum_{\tilde{k}=0}^{\infty} (\tilde{k} + 1) \left(\frac{\bar{\lambda} + \bar{\mu}}{\lambda + \mu}\right)^{\tilde{k}} f^{\tilde{k}}, \quad (2.5)$$

який з обмеженням розкладання по параметру  $f$  до третього степеня дає (пор. з (2.2))

$$\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 = \frac{n^2}{(\lambda + \mu)^2} + \frac{2n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda + \mu)^3} f + \frac{3n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})^2}{(\lambda + \mu)^4} f^2 + \frac{4n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})^3}{(\lambda + \mu)^5} f^3 + O(f^4). \quad (2.6)$$

Підстановка (2.6) з відкиданням  $O(f^4)$  у вираз (1.1) дає залежність для вільної енергії у вигляді поліноміальної апроксимації 4-го степеня (пор. з (2.3))

$$\begin{aligned} \Phi = & \Phi_0^* + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2}{2(\lambda + \mu)} - f \left[ \phi_0^* + \alpha T + \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{el}^2 + \frac{n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{2(\lambda + \mu)^2} \right] + \\ & + f^2 \left[ \frac{\phi_1}{2} + \frac{n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})^2}{2(\lambda + \mu)^3} \right] - f^3 \left[ \frac{\phi_2}{3} + \frac{n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})^3}{2(\lambda + \mu)^4} \right] + f^4 \left[ \frac{\phi_3}{4} - \frac{2n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})^4}{(\lambda + \mu)^5} \right]. \quad (2.7) \end{aligned}$$

Якщо в вираз (2.7) замість  $f$  підставити зв'язок (1.17), отримаємо потенціал  $\Phi(\varphi)$ , схожий за формою з (1.19), з тією відмінністю, що сталі розкладання будуть включати складові, які залежать від тиску. Зазначений потенціал має громіздкий вигляд, тому в явному вигляді його тут не наводимо.

На рис. 2.3 суцільними лініями показані залежності вільної енергії  $\Phi(f)$  і  $\Phi(\varphi)$ , розраховані з використанням початкового виразу (1.1), а символами - залежності при тих же параметрах, що відповідають апроксимації (2.7).

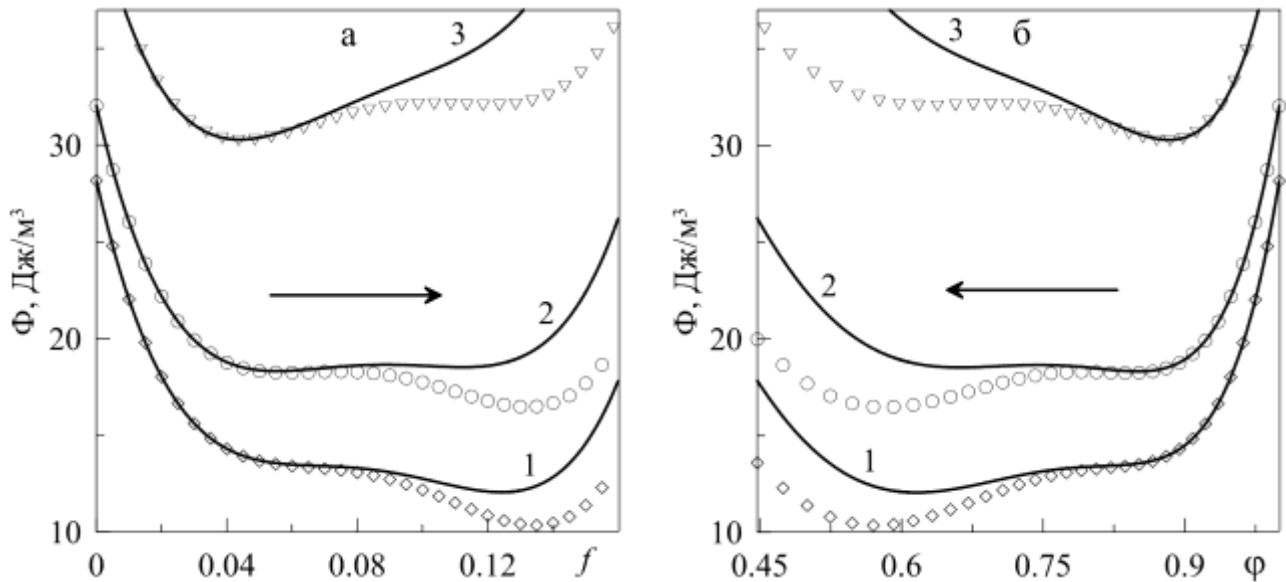


Рисунок 2.3 – Залежності вільної енергії  $\Phi$  від  $f$  (а) і  $\phi$  (б) при параметрах рис. 1.5 і  $T = 310$  К,  $V = 0$  нм/с. Суцільні криві відповідають виразу (1.1), показані символами - виразу (2.7). Криві 1-3 відповідають значенням зовнішніх напружень  $n = -7 \cdot 10^5$  Па;  $-8,5 \cdot 10^5$  Па і  $-1,15 \cdot 10^6$  Па, відповідно.

На рисунку показані 3 випадки: криві 1 - рідиноподібна структура мастильного матеріалу, криві 3 - твердоподібна структура, і для кривих під номером 2 реалізуються два стаціонарні стани, які в динамічному випадку можуть бути причиною переривчастого режиму руху. Як це вже було зазначено вище, при малих значеннях зовнішнього тиску залежності добре збігаються, а при підвищенні навантаження похибка в області рідиноподібної структури мастильного матеріалу при великих значеннях параметра порядку  $f$  стає суттєвою. Однак, в обраному на малюнку діапазоні нормальних зовнішніх напружень при використанні поліноміальної апроксимації (2.7) можливий опис фазового переходу першого роду з прийнятною точністю. Таким чином, на прикладах фазового переходу першого і другого роду показано, що розроблений підхід справедливий для малих зовнішніх навантажень на поверхні, що труться. Причому при збільшенні навантаження його вплив може бути враховано варіацією значень констант розкладання. Однак, при подальшому збільшенні зовнішнього навантаження для точного опису поведінки системи необхідно враховувати вищі степені розкладання вільної

енергії (які зникають при  $n = 0$ ), щоб звести до мінімуму помилку, що виникає при використанні апроксимаційного виразу для першого інваріанта (2.2), або (2.6), в залежності від розглянутого завдання. Оскільки потужності сучасних комп'ютерів дозволяють враховувати будь-яку кількість доданків розкладання типу (2.2), чисельне моделювання процесу межового тертя в даному випадку взагалі не представляє ніякої складності.

## ВИСНОВКИ

Для опису фазового стану межового змащення введений параметр порядку, який представляє надлишковий об'єм, значення якого зв'язується з наявністю в мастилі дефектів і неоднорідностей. Показано, що в разі симетричного розкладання вільної енергії за степенями параметра порядку упорядкований стан мастила відповідають нульового надлишкового об'єму (кристалічний стан при відсутності структурних дефектів). У разі несиметричного розкладання нульове значення надлишкового об'єму відповідає як рідиноподібному, так і твердоподібному мастилу.

Використано інший підхід для опису стану мастила, у якому параметром порядку обирається періодична частина мікроскопічної функції густини середовища. Квадрат даного параметра порядку зводиться до модуля зсуву, який у рідиноподібній вазі нульовий, а в твердоподібній – приймає ненульове значення. Порівняння двох підходів показує, що в деяких ситуаціях обидва підходи можуть з точністю переходити один в інший, вказані відповідні випадки. Однак, в загальному випадку ці два підходи описують фізично різні системи, оскільки по-різному інтерпретують переходи між стаціонарними значеннями модуля зсуву в точці фазового переходу, тому не є еквівалентними.

**ПЕРЕЛІК ДЖЕРЕЛ ПОСИЛАНЬ**

1. Ciamarra M. P., Lara A. H., Lee A. T. et al. Dynamics of drag and force distributions for projectile impact in a granular medium // *Phys. Rev. Lett.* 2004. V. 92, N 19. P. 194301.
2. Jop P., Forterre Y., Pouliquen O. A constitutive law for dense granular flows // *Nature*. 2006. V. 441, N 7094. P. 727-730.
3. Bernard B. Impacts in mechanical systems: analysis and modelling / B. Bernard. Berlin, New York: Springer, 2000.
4. Parteli E. J. R., Schmidt J., Blümel C. et al. Attractive particle interaction forces and packing density of fine glass powders // *Sci. Rep.* 2014. V. 4. P. 6227 (7 pp.).
5. Maw N., Barber J. R., Fawcett J. N. The oblique impact of elastic spheres // *Wear*. 1976. V. 38, N 1. P. 101-114.
6. Hauger W. Technische Mechanik. Bd 3: Kinetik 7 / W. Hauger, W. Schnell, D. Gross. Berlin: Springer, 2002.
7. Hertz H. J. Ueber die Berührung fester elastischer Körper // *J. für die reine Angew. Math.* 1882. V. 92. P. 156-171.
8. Mindlin R. D. Compliance of elastic bodies in contact // *ASME J. Applied Mech.* 1949. V. 16. P. 259-268.
9. Barber J. R. Adhesive contact during the oblique impact of elastic spheres // *Appl. Math. Phys. (ZAMP)*. 1979. V. 30, N 3. P. 468-476.
10. Maw N., Barber J. R., Fawcett J. N. The role of elastic tangential compliance in oblique impact // *Trans. ASME: J. Lubr. Technol.* 1981. V. 103, N 1. P. 74-80.
11. Labous L., Rosato A. D., Dave R. N. Measurements of collisional properties of spheres using high-speed video analysis // *Phys. Rev. E*. 1997. V. 56, N 5. P. 5717-5725.
12. Foerster S. F., Louge M. Y., Chang H. et al. Measurements of the collision properties of small spheres // *Phys. Fluids*. 1994. V. 6, N 3. P. 1108-1115.

13. Sondergaard R., Chaney K., Brennen C. E. Measurements of solid spheres bouncing off flat plates // *ASME J. Appl. Mech.* 1990. V. 57, N 3. P. 694-699
14. Stronge W. J. *Impact Mechanics* / W. J. Stronge. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
15. Jia Y. -B. Three-dimensional impact: energy-based modeling of tangential compliance // *The International Journal of Robotics Research.* 2013. V. 32, N 1. P. 56-83.
16. Popov V. L., Psakhie S. G., Numerical simulation methods in tribology: possibilities and limitations // *Tribology International.* 2007. V. 40, N. 6. P. 916-923.
17. Popov V. L. *Method of dimensionality reduction in contact mechanics and friction* / V. L. Popov, M. Heß. Berlin: Springer, 2014.
18. Lyashenko I. A., Popov V. L. Impact of an elastic sphere with an elastic half space revisited: Numerical analysis based on the method of dimensionality reduction // *Sci. Rep.* 2015. V. 5. P. 8479 (5 pp.).
19. Willert E., Popov V. L. Impact of an elastic sphere with an elastic half space with a constant coefficient of friction: Numerical analysis based on the method of dimensionality reduction // *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.* 2016. DOI: 10.1002/zamm.201400309.
20. Lyashenko I. A., Willert E., Popov V. L. Adhesive impact of an elastic sphere with an elastic half space: Numerical analysis based on the method of dimensionality reduction // *Mech. Mater.* 2016. V. 92. P. 155-163.
21. Lyashenko I. A., Khomenko A. V., Metlov L. S. Nonlinear thermodynamic model of boundary friction // *Journal of Friction and Wear.* – 2011. – Vol. 32, № 2. – P. 113–123.
22. Качанов Л. М. *Основы теории пластичности* / Л. М. Качанов. – Москва : Наука, 1969. – 420 с.

23. 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.).
24. Lyashenko I. A., Zaskoka A. M. Melting of the ultrathin lubricant film between atomically flat solid surfaces as second-order phase transition // *Journal of Physical Studies*. – 2013. – Vol. 17, № 1. – P. 1002 (7 pp.).