Я.О. ЛЯШЕНКО^{1,2}

- ¹ Technische Universität Berlin, Institut für Mechanik, FG Systemdynamik und Reibungsphysik (Sekr. C8-4, Raum M 243, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin, Germany; e-mail: i.liashenko@tu-berlin.de)
- ² Сумський державний університет (Вул. Римського-Корсакова, 2, Суми 40007)

ЗВ'ЯЗОК МІЖ ПАРАМЕТРАМИ ПОРЯДКУ МОДУЛЯЦІЇ ГУСТИНИ І НАДЛИШКОВОГО ОБ'ЄМУ ПРИ ОПИСІ СТАЦІОНАРНИХ СТРУКТУРНИХ СТАНІВ МЕЖОВОГО МАСТИЛА

В рамках теорії фазових переходів Ландау з використанням модуляції густини і надлишкового об'єму в ролі параметрів порядку описано фазовий перехід другого роду між структурними станами межового мастила, затиснутого між атомарногладкими твердими поверхнями. Знайдено зв'язок між таким чином визначеними параметрами порядку. Досліджено стаціонарні стани мастильного матеріалу в залежності від керуючих параметрів – температури мастила, пружної деформації в змащувальному шарі і зовнішнього навантаження на поверхні тертя. Проведено моделювання кінетики плавлення в рамках механічного аналога трибологічної системи із пружністю.

Ключові слова: межове мастило, сила тертя, переривчастий режим ковзання, параметр порядку, фазовий перехід.

1. Вступ

УДК 621.891

В останні роки в різних галузях науки і техніки знаходять широке застосування різноманітні мікромеханічні системи. Вони використовуються в біомедицині, при побудові нових джерел енергії, в системах позиціонування в мікро- і наноелектроніці і т.п. При функціонуванні таких систем між контактуючими частинами виникає сила тертя, яка повинна бути строго контрольованою, оскільки при перевищенні її допустимих значень механізми можуть передчасно вийти з ладу. Для зменшення тертя використовуються мастильні матеріали, що знаходяться в зоні контакту поверхонь [1–3]. У мікромеханічних системах товщина мастильного шару, як правило, не перевищує кілька

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11

атомарних діаметрів, а поверхні тертя є атомарно-гладкими [4, 5]. Багато експериментів говорять про те, що в такому межовому режимі властивості мастильних матеріалів істотно відрізняються від властивостей об'ємних мастил. Межовому режиму притаманні зсувне плавлення, різні типи переривчастого руху, аномальне збільшення в'язкості мастильного шару зі зменшенням його товщини, відмінність температур плавлення і тверднення у порівнянні із аналогічними температурами для тих самих речовин в об'ємних системах, ефекти пам'яті, складні залежності в'язкості від температури, товщини шару, тиску і градієнта швидкості, багаторазове збільшення (іноді до 10 порядків) часів релаксації в тонких шарах [4, 5] і т.п. Незважаючи на велику кількість експериментальних [3,4,6] і теоретичних [7–10] робіт, а також результатів комп'ютерного моделювання [5, 11-16] досі не існує

[©] Я.О. ЛЯШЕНКО, 2021

єдиного підходу, який дозволив би описати всі згадані особливості. Тому вивчення процесів межового тертя має підвищену актуальність, зокрема в рамках розглянутого в цій роботі термодинамічного подання проблеми [17].

У попередніх роботах [10, 18–20] запропонована феноменологічна теорія межового тертя, що заснована на теорії фазових переходів Ландау другого роду. Для опису станів мастильного матеріалу введений параметр порядку φ , який подає періодичну частину мікроскопічної функції густини середовища (модуляція густини). У рідиноподібному стані мастильного матеріалу модуляція густини зникає. Тому введений таким чином параметр порядку приймає нульове значення $\varphi = 0$. Якщо мастильний матеріал знаходиться в твердоподібному стані, параметр порядку $\varphi > 0$. Варто зазначити, що в об'ємних матеріалах плавлення може здійснюватися виключно відповідно до механізму фазового переходу першого роду, як це показав Ландау [21]. Однак, на симетрію фазового стану межового мастила істотно впливає атомарний рельєф поверхонь, що труться, такі поверхні після плавлення мастильного шару залишаються твердими. Тому в режимі межового тертя часто спостерігаються фазові переходи другого роду між рідиноподібними і твердоподібними станами мастильного матеріалу. Це було виявлено експериментально [4], в ході комп'ютерного моделювання [11–15], а також теоретично [10]. Більш того, існують роботи, в яких автори взагалі заперечують можливість існування фазового переходу першого роду [22]. Однак, тип фазового переходу залежить від форми молекул мастильного матеріалу. Наприклад, для полімерних молекул фазовий перехід першого роду має місце, про що говорить комп'ютерне моделювання [5]. Особливості фазового переходу першого роду в рамках ідеології, що запропонована в роботах [10, 18, 19], вивчені нами в [23–25].

Нами був розроблений підхід, в якому як параметр порядку використовується надлишковий об'єм f, що виникає при плавленні мастильного матеріалу за рахунок хаотизації структури твердого тіла [26, 27]. Перевагою такого підходу є те, що він явно враховує вплив зовнішнього навантаження на поверхні тертя, яке вводиться через нормальні зовнішні напруження -n. З ростом абсолютної величини n надлишковий об'єм f зменшується за рахунок здавлювання мастильного шару обмежуючими стінками. Були розглянуті дві ситуації: несиметричне розвинення термодинамічного потенціалу [27] і симетричне [26]. У першому випадку описується фазовий перехід між двома ненульовими значеннями надлишкового об'єму *f*. 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 мастильного шару описані як стрибкоподібні фазові переходи першого роду.

Обидва згадані вище підходи оперують параметрами порядку, в які вкладається різний фізичний зміст, але описують один і той самий процес межового тертя. Тому корисно буде встановити зв'язок між параметрами порядку φ і f. При цьому варто розуміти, що такий зв'язок може бути встановлений не завжди. Наприклад, у випадку реалізації переходу склування [22] можлива ситуація, коли величина надлишкового об'єму f при плавленні змінюється, тому він може відігравати роль параметра порядку. У той самий час підхід, який оперує параметром порядку модуляції густини φ , в цьому випадку застосовувати не можна, оскільки модуляція густини при переході склування приймає нульові значення (відсутній дальній порядок чергування атомів) в обох фазах. Частково зв'язок між параметрами порядку модуляції густини φ і надлишкового об'єму f був знайдений в роботі [17]. Однак, питання зв'язку між параметрами порядку ще далеко від повного розуміння. Метою запропонованої роботи є визначення такого зв'язку у випадку реалізації фазового переходу другого роду.

2. Термодинамічна модель фазового переходу другого роду

2.1. Модуляція густини як параметр порядку

2.1.1. Формулювання моделі

У роботах [10,18,19] у ролі параметра порядку вибрана амплітуда періодичної частини мікроскопічної функції густини середовища φ . У рідинному стані мікроскопічна функція густини однорідна, тому $\varphi = 0$, у твердому стані шар мастила має

кристалічну структуру, тому $\varphi \neq 0$. За температур, близьких до температури фазового преходу, розвинення параметра порядку у ряд прийме вигляд [21]:

$$\Phi_{\rm therm} = a_1 \varphi^2 + \frac{b}{4} \varphi^4, \qquad (1)$$

де величини a_1 і b – функції температури і тиску. Якщо температура мастила T близька до температури фазового перетворення T_c , то можна записати [21]:

$$a_1 = \alpha (T - T_c). \tag{2}$$

Енергія (1) відповідає недеформованому стану мастила. Якщо мастильний шар випробовує пружні деформації $\varepsilon_{\rm el}$, до вільної енергії (1) потрібно додати енергію пружньої деформації $\mu \varepsilon_{\rm el}^2/2$, де модуль зсуву $\mu = a \varphi^2$. У результаті розвинення густини вільної енергії Φ_{φ} за степенями параметра порядку модуляції густини φ прийме вигляд [10]:

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

де останній доданок описує просторово неоднорідний розподіл параметра порядку. В роботі [25] було проведено моделювання процесу плавлення мастила із урахуванням просторово неоднорідного розподілу параметра порядку у рамках метода редукції розмірності [28] і було показано, що градієнтний доданок впливає на поведінку системи несуттєво. Тому далі для спрощення будемо розглядати однорідну систему, що еквівалентно значенню g = 0 Дж/м.

Пружні напруження, що виникають в шарі мастила, визначаються як $\sigma_{\rm el} = \partial \Phi_{\varphi} / \partial \varepsilon_{\rm el}$ [10]:

$$\sigma_{\rm el} = a\varphi^2 \varepsilon_{\rm el} = \mu_s \varepsilon_{\rm el},\tag{4}$$

де модуль зсуву мастила μ_s дорівнює нулю в рідиноподібному стані і приймає ненульові значення в твердоподібному. Стаціонарні значення параметра порядку φ_0 і модуля зсуву $\mu_{s,0}$ визначаються з умови $\partial \Phi_{\varphi}/\partial \varphi = 0$ [10]:

$$\varphi_0 = \sqrt{\frac{2\alpha \left(T_c - T\right)}{b} - \frac{a}{b}\varepsilon_{\rm el}^2},\tag{5}$$

$$\mu_{s,0} = a\varphi_0^2 = \frac{a\left[2\alpha(T_c - T) - a\varepsilon_{\rm el}^2\right]}{b}.$$
(6)

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11

Вирази (5) і (6) визначають критичні значення для пружної деформації і температури

$$\varepsilon_{\rm el,c0} = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}},\tag{7}$$

$$T_{c0} = T_c - \frac{a\varepsilon_{\rm el}^2}{2\alpha},\tag{8}$$

при перевищенні яких мастило плавиться.

Незважаючи на те, що мікроскопічна густина речовини може бути виміряна у комп'ютерному експерименті [11–15, 17], а значення параметра порядку φ знайдені безпосередньо з експерименту, для універсальності його набагато зручніше представити в нормованому безрозмірному вигляді. Будемо вважати, що параметр порядку φ нормований на максимальну величину, за рахунок чого приймає значення від 0 до 1. Значення $\varphi = 1$ відповідає максимально впорядкованому мастилу, що згідно з (5) реалізується за нульової абсолютної температури T = 0 К і пружних деформаціях $\varepsilon_{\rm el} = 0$. Рівняння (5) спільно з умовою $\varphi_{\rm max} = 1$ при T = 0 К і $\varepsilon_{\rm el} = 0$ приводять до зв'язку параметрів розвинення у вигляді [17]:

$$b - 2\alpha T_c = 0, (9)$$

тобто на них накладаються додаткові обмеження. Зазначимо, що при наявності точно виміряних критичних величин (7) і (8) всі параметри розвинення $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3) також визначаються точно. Але, для цього необхідний відсутній в літературі специфічний набір експериментальних даних для конкретної системи. Більш того, нашою метою є якісний рівень опису. Тому не будемо обмежуватися описом конкретної системі, а виберемо параметри таким чином, щоб значення критичних температур і деформацій перебували в експериментально спостережуваному діапазоні [4]. Однак, при цьому будемо вибирати параметри розвинення таким чином, щоб вони задовольняли співвідношення (9).

На рис. 1 показані залежності стаціонарних значень параметра порядку φ_0 і модуля зсуву $\mu_{s,0}$ від пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ для різних значень температури мастильного матеріалу T при фіксованих параметрах моделі. Параметри обрані таким чином, щоб температури плавлення, а також критичні деформації і значення модуля зсуву приблизно



Рис. 1. Залежності стаціонарного значення параметра порядку φ_0 від пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ (5) при параметрах розвинення $T_c = 290$ К, $\alpha = 0.8 \ \text{Дж} \cdot \text{K}^{-1}/\text{M}^3$, $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па, $b = 464 \ \text{Дж}/\text{M}^3$ і фіксованих температурах $T_{1-3} = 0$, 190, 270 К (a); відповідні залежності стаціонарного значення модуля зсуву $\mu_{0,s}$ від пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ (6) (δ). Символами на панелі (δ) показані результати комп'ютерного моделювання, що наведені в роботі [16]

відповідали діапазону експерементально спостережуваних величин. З рисунка легко бачити, що при нульовій температурі $T_1 = 0$ К у відсутності зсуву ($\varepsilon_{\rm el} = 0$) реалізуються максимальне значення параметра порядку φ_0 і модуля зсуву $\mu_{s,0}$, який в зазначеному випадку чисельно збігається зі значенням константи a в розвиненні $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3). Таким чином, параметр розвинення а задає максимальне значення модуля зсуву μ_s у відсутності теплових флуктуацій (T = 0 K) і зовнішнього збурення системи ($\varepsilon_{\rm el} = 0$). Також рисунок демонструє зменшення значень параметра порядку і модуля зсуву зі зростанням деформації $\varepsilon_{\rm el}$ і температури мастильного матеріалу T, оскільки розвинення (3) враховує термодинамічне і зсувне плавлення [10]. Оскільки з ростом зазначених величин параметр порядку φ_0 зменшується до нульового значення безперервно, відповідно до ідеології теорії фазових переходів Ландау має місце фазовий перехід другого роду [21, 29].

2.1.2. Порівняння з результатами моделювання і експериментом

Описана вище модель базується на розвиненні вільної енергії (3). Правильний вибір розвинення забезпечує адекватність побудованої на ньому моделі. Вище ми коротко описали міркування, які призвели до вибору вільної енергії у формі (3). У роботах [10, 20] можна знайти більш детальний опис потенціалу (3) і аналіз фізичної природи зсувного плавлення. Однак модель зсувного плавлення, що описується у запропонованій роботі, є феноменологічною, тобто заснована на експериментальних результатах. Тому для додаткового підтвердження адекватності запропонованого підходу проведемо порівняння моделі як з реальним експериментом, так і з результатами моделювання інших авторів. Так, на рис. 1, б символами показана залежність модуля зсуву від деформації, отримана в роботі [16], у якій за допомогою методів молекулярної статистики досліджується поведінка атомарно тонких шарів, що затиснуті між жорсткими поверхнями, при їх зсуві. В [16] всі залежності наведені в безрозмірних величинах. Тому для порівняння нашого підходу із моделюванням, проведеним у [16], для залежності $\mu(\varepsilon)$ із [16] по обох осях були вибрані масштаби, за яких результати моделювання задовільно накладаються на теоретично розраховану криву. Однак, ці масштаби не є довільними. Наприклад, на осі є_{еl} масштаб задається значенням $\varepsilon_{\rm el},$ за якого модуль зсуву стає нульовим.

У роботі [16] наведені залежності пружних напружень $\sigma_{\rm el}$ від деформації $\varepsilon_{\rm el}$, які в нашій моделі задаються рівняннями (4) і (6). Якщо об'єднати ці рівняння, отримаємо

$$\sigma_{\rm el} = \frac{a \left[2\alpha (T_c - T) - a\varepsilon_{\rm el}^2\right]\varepsilon_{\rm el}}{b} \times H \left(1 - \varepsilon_{\rm el}/\varepsilon_{\rm el,c0}\right), \tag{10}$$

де введено функцію Хевісайда H(x), а величина $\varepsilon_{\rm el,c0}$, як і раніше, визначається виразом (7). Для того, щоб можна було порівняти як можна більше залежностей, (10) зручно подати у безрозмірному вигляді. Рівняння (10) зі збільшенням деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ подає зростання напружень $\sigma_{\rm el}$ від нуля до максимального значення

$$\sigma_{\rm el}^{\rm max} = \frac{2\sqrt{a}}{b} \left(\frac{2}{3}\alpha(T_c - T)\right)^{3/2},\tag{11}$$

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11

яке реалізується за деформації

$$\varepsilon_{\rm el}\left(\sigma_{\rm el}^{\rm max}\right) = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{3a}} = \frac{\varepsilon_{\rm el,c0}}{\sqrt{3}}.$$
 (12)

Введемо безрозмірні напруження $\tilde{\sigma}_{\rm el}$ і деформації $\tilde{\varepsilon}_{\rm el}$ таким чином, що $\tilde{\sigma}_{\rm el} = \sigma_{\rm el}/\sigma_{\rm el}^{\rm max}$ і $\tilde{\varepsilon}_{\rm el} = \varepsilon_{\rm el}/\varepsilon_{\rm el,c0}$. Тоді (10) запишеться у спрощеному вигляді

$$\tilde{\sigma}_{\rm el} = \frac{3\sqrt{3}}{2} \left(1 - \tilde{\varepsilon}_{\rm el}^2\right) \tilde{\varepsilon}_{\rm el} \times H \left(1 - \tilde{\varepsilon}_{\rm el}\right). \tag{13}$$

На рис. 2 суцільна крива демонструє безрозмірну залежність (13). Символами на рисунку наведені дані, які отримані в роботі [16] для одно-, двохта триатомного шару мастила, що затиснуто між твердими поверхнями, а також результати реальних експериментів, що описані у роботі [30]. В експериментах вимірювалися напруження між атомарно гладкими поверхнями слюди, які були розділені шаром мастила із товщиною 0.7 ± 0.2 нм і здійснювали періодичні рухи із частотою 250 Гц. Квадратиками (П) наведено результати експерименту, у якому у ролі мастила використовувалися молекули 3-метіл-ундекана (СН₃-С₁₁) при навантаженні на поверхні 2 мН. Зірочки (*) демонструють експеримент, у якому поверхні були розділені шаром перфторгептагліма (perfluoroheptaglyme) при нульовому зовнішньому навантаженні. На рис. 2 продемонстровано досить гарний збіг теоретичних результатів із результатами комп'ютерного моделювання і експеримента, що підтверджує адекватність теорії, яка заснована на потенціалі (3). Треба зазначити, що в експерименті залежність $\sigma_{\rm el}(\varepsilon_{\rm el})$ може бути виміряна тільки до максимального значення пружних напружень, оскільки спадаюча частина залежності відповідає нестійким станам. Тому результати експериментів, що показані на рис. 2, всі знаходяться в діапазоні $\sigma_{\rm el} < \sigma_{\rm el}^{\rm max}$. Однак результати моделювання показані у більш широкому діапазоні, що підтверджує спадання залежності $\sigma_{\rm el}(\varepsilon_{\rm el})$ після перевищення пружними деформаціями критичної величини (12).

2.2. Надлишковий об'єм як параметр порядку

У попередньому підрозділі роботи сформульовано модель, у якій як параметр порядку використову-

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11



Рис. 2. Суцільна крива – залежність пружних напружень від деформацій (13), де напруження виміряні в одиницях $\sigma_{\rm el}^{\rm max}$ (11), а деформації – в одиницях $\varepsilon_{\rm el,c0}$ (7). Символами показані результати моделювання, проведеного у роботі [16] для одноатомного (\circ), двоатомного (\triangle) і триатомного (+) шарів мастила, що затиснуто між поверхнями, які зсуваються. Результати реальних експериментів, що описані у [30], показані символами (□) і (\star)

ється модуляція густини φ , значення якої зменшується із плавленням мастила, яке, у свою чергу, відбувається при підвищенні температури T або зсувних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$. Згідно із феноменологічною теорією фазових переходів Ландау у ролі параметра порядку можна використовувати будьяку фізичну величину, яка відрізняє фазові стани речовини і яка може бути використана для запису розвинення вільної енергії у ряд. Тобто параметр порядку повинен бути безперервною функцією у деякому інтервалі. Гарним кандидатом на роль параметра порядку є надлишковий об'єм f, який з'являється у мастилі за рахунок його розпирення при плавленні. Надлишковий об'єм згідно до парадигми робіт [31, 32] визначимо як

$$f = \frac{\rho_{rcp} - \rho}{\rho},\tag{14}$$

де ρ – густина мастильного матеріалу, а ρ_{rcp} – максимально можливе значення ρ . Вираз (14) слідує із визначення відносного значення надлишкового об'єму $f \equiv \delta Q/Q$, де δQ – додатковий об'єм, що з'являється при нагріванні і плавленні мастила, а Q – мінімальний об'єм мастила. Більш детально фізичний зміст параметра f описаний у розділі 5 у роботі [17].

Розвинення вільної енергії для опису фазового переходу другого роду за ступенями параметра порядку надлишкового об'єму f, засноване на ідеології, що запропонована в роботах [26,27], має вигляд [17,33]: 1

$$\Phi_{f} = \frac{1}{2}\lambda \left(\varepsilon_{ii}^{\text{el}}\right)^{2} + \mu \left(\varepsilon_{ij}^{\text{el}}\right)^{2} + \left[\phi_{0}^{*} - \frac{1}{2}\bar{\lambda} \left(\varepsilon_{ii}^{\text{el}}\right)^{2} - \frac{\bar{\mu} \left(\varepsilon_{ij}^{\text{el}}\right)^{2} - \alpha'T\right]f^{2} + \frac{1}{4}\phi_{1}f^{4}, \qquad (15)$$

з додатними сталими розвинення λ , μ , ϕ_0^* , $\bar{\lambda}$, $\bar{\mu}$, α' і ϕ_1 . У виразі (15) перший і другий інваріанти тензора деформації задаються співвідношеннями [17, 27, 34] (див. додаток А):

$$\varepsilon_{ii}^{\rm el} = \frac{n}{\lambda_{\rm eff} + \mu_{\rm eff}},\tag{16}$$

$$\left(\varepsilon_{ij}^{\rm el}\right)^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau}{\mu_{\rm eff}}\right)^2 + \left(\varepsilon_{ii}^{\rm el}\right)^2 \right],\tag{17}$$

в яких зовнішні нормальні напруження n задають навантаження на поверхні тертя, τ – зсувні напруження, а $\mu_{\rm eff}$ і $\lambda_{\rm eff}$ – пружні параметри. Зазначимо, що коефіцієнт при f^2 у виразі (15) змінює знак на від'ємний при підвищенні температури T або пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$, що приводить до плавлення, оскільки стаціонарне значення параметра порядку f_0 стає при цьому ненульовим.

Пружні напруження σ_{ij}^{el} , що виникають в змащувальному шарі, згідно з (15) визначаться як [17, 26, 27]:

$$\sigma_{ij}^{\rm el} = 2\mu_{\rm eff}\varepsilon_{ij}^{\rm el} + \lambda_{\rm eff}\varepsilon_{ii}^{\rm el}\delta_{ij},\tag{18}$$

де введені ефективні пружні параметри

$$\mu_{\rm eff} = \mu - \bar{\mu} f^2, \tag{19}$$

$$\lambda_{\text{eff}} = \lambda - \bar{\lambda} f^2, \qquad (20)$$

що зменшуються з плавленням при зростанні величини надлишкового об'єму f. З виразу (18) слідує співвідношення для визначення зсувної компоненти пружних напружень [33, 34]:

$$\tau = \mu_{\rm eff} \varepsilon_{\rm el},\tag{21}$$

де $\varepsilon_{\rm el}$ – пружна компонента зсувної деформації.

Оскільки модель, в якій параметром порядку є модуляція густини φ , явно не містить зовнішнє навантаження, для встановлення зв'язку між параметрами порядку модуляції густини φ і надлишкового об'єму f спочатку розглянемо спрощений випадок відсутності зовнішнього навантаження n = 0 Па. У цьому випадку перший інваріант (16) $\varepsilon_{ii}^{\rm el} \equiv 0$, а другий інваріант (17) з точністю до постійної зводиться до квадрата зсувної деформації $(\varepsilon_{ij}^{\rm el})^2 \equiv \varepsilon_{\rm el}^2/2$. При цьому потенціал (15) приймає більш простий вигляд

$$\Phi_f = \frac{\mu}{2}\varepsilon_{\rm el}^2 + \left(\phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2}\varepsilon_{\rm el}^2 - \alpha'T\right)f^2 + \frac{1}{4}\phi_1 f^4.$$
(22)

Умова $\partial \Phi_f / \partial f = 0$ приводить до стаціонарних значень параметра порядку f_0 і модуля зсуву $\mu_{\rm eff,0}$

$$f_{0} = \sqrt{\frac{\bar{\mu}\varepsilon_{\rm el}^{2} + 2\alpha'T - 2\phi_{0}^{*}}{\phi_{1}}},$$

$$\mu_{\rm eff,0} = \mu - \frac{\bar{\mu}}{\phi_{1}} \left(\bar{\mu}\varepsilon_{\rm el}^{2} + 2\alpha'T - 2\phi_{0}^{*}\right) \times$$
(23)

$$\times H\left(\bar{\mu}\varepsilon_{\rm el}^2 + 2\alpha'T - 2\phi_0^*\right). \tag{24}$$

Залежності (23), (24) при фіксованих параметрах моделі продемонстровані на рис. З. З рисунка слідує, що з ростом пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ і температури T надлишковий об'єм f_0 збільшується, що приводить до зменшення модуля зсуву $\mu_{\rm eff.0}$. Розглянемо більш детально криву, що побудована за температури Т₁. У порівнянні з поведінкою, яку демонструє рис. 1, тут є суттєва відмінність. На рис. 1, б модуль зсуву з ростом деформацій (або температури) монотонно зменшується, а точка фазового переходу другого роду на залежностях $\mu_{s,0}$ знаходиться при значенні $\mu_{s,0} = 0$ Па. На залежності, що відповідає температурі T_1 на рис. 3, δ , з ростом зазначених керуючих параметрів модуль зсуву спочатку залишається постійним (приймає максимальне значення при $f_0 = 0$), а потім, після точки фазового переходу, починає зменшуватися. Така відмінність між цими двома підходами реалізується лише за низьких температур. У діапазоні температур, за яких проводяться відповідні експерименти [4], обидва підходи описують однакову поведінку (див. криві T_2 і T_3 на рис. 1, δ і рис. 3, δ).

2.3. Зв'язок між параметрами порядку модуляції густини і надлишкового об'єму

Зв'язок між розглянутими вище моделями межового тертя може бути встановлений не завжди.

¹ Зазначимо, що розкладання вільної енергії містить доданки із коефіцієнтами μ, μ, λ i λ y стандартному вигляді, який використовується для запису загального виразу вільної енергії деформованого ізотропного тіла [33]. Розкладання вільної енергії за степенями параметра порядку f засновано на тих самих міркуваннях, що і вище наведений вираз (3).

Зокрема, в ситуації, коли здійснюється перехід склування, модуляція густини φ набуває нульових значень в обох фазах, тому її не можна використовувати як параметр порядку. Але в цій ситуації можна застосовувати модель, що у ролі параметра порядку оперує надлишковим об'ємом f. Можна розглянути узагальнену ситуацію, в якій параметр порядку повинен бути двокомпонентним (функцією модуляції густини і надлишкового об'єму). У такому випадку термодинамічний потенціал $\Phi(\varphi, f)$ в просторі параметра порядку представлятиме тривимірну залежність. Такий підхід дозволить описати більш широкої клас систем, оскільки він зводиться до моделей, розглянутих вище, якщо одна компонента параметра порядку змінюється несуттєво (це може бути, наприклад, нульове значення модуляції густини φ при переході склування). Більш того, від такого тривимірного представлення вільної енергії можна перейти до ситуацій, що розглядаються у даній роботі, якщо знати зв'язок між параметрами порядку φ і f, який в кожному конкретному випадку може бути визначений експериментальним шляхом. Встановимо такий зв'язок, вважаючи, що модулі зсуву μ_s і μ_{eff} в обох моделях подають одну і ту саму величину. Це є наближенням, оскільки, як ми показали вище, обидві моделі можуть показувати фізично різну поведінку при низьких температурах. Однак, використання такого наближення дозволяє перейти від опису процесу межового тертя за допомогою модуляції густини до еквівалентного опису з використанням надлишкового об'єму, і навпаки. Проблема побудови єдиного підходу, в якому вільна енергія є функцією двокомпонентного параметра порядку, при цьому залишається відкритою.

2.3.1. Перехід від надлишкового об'єму до модуляції густини

Умова еквівалентності модулів зсуву $\mu_s = \mu_{\rm eff}$ (див. вирази (4) і (19)) приводить до співвідношення

$$f^2 = \frac{\mu}{\bar{\mu}} - \frac{a}{\bar{\mu}}\varphi^2.$$
(25)

При підстановці зв'язку (25) в вираз вільної енергії $\Phi_f(f)$ (22) отримаємо еквівалентний потенціал у



Рис. 3. Залежності стаціонарного значення параметра порядку f_0 від пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ (23) при параметрах розвинення $\phi_0^* = 1450 \ \text{Дж/м}^3$, $\phi_1 = 7,25 \cdot 10^6 \ \text{Дж/м}^3$, $\alpha' = 100 \ \text{Дж} \cdot \text{K}^{-1}/\text{M}^3$, $\mu = 1,9 \cdot 10^{10} \ \text{Па}$, $\bar{\mu} = 2,5 \cdot 10^{12} \ \text{Па}$ і фіксованих температурах $T_{1-3} = 0$, 190, 270 К (*a*); залежності стаціонарного значення ефективного модуля зсуву $\mu_{\rm eff,0}$ від пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ (19) при параметрах рис. 3, *a* (*б*)

вигляді

$$\Phi_{f \to \varphi} = \left[\frac{\phi_0^* \mu}{\bar{\mu}} - \frac{\alpha' T \mu}{\bar{\mu}} + \frac{\phi_1 \mu^2}{4\bar{\mu}^2} \right] + \left(\frac{a}{2} \varepsilon_{\rm el}^2 + \frac{\alpha' T a}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_0^* a}{\bar{\mu}} - \frac{\phi_1 a \mu}{2\bar{\mu}^2} \right) \varphi^2 + \left(\frac{\phi_1 a^2}{4\bar{\mu}^2} \right) \varphi^4.$$
(26)

Із порівняння виразів (26) і $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3) знайдемо зв'язки між параметрами розвинення

$$b = \frac{\phi_1 a^2}{\bar{\mu}^2}; \quad \alpha = \frac{\alpha' a}{\bar{\mu}}; \quad T_c = \frac{\phi_0^*}{\alpha'} + \frac{\phi_1 \mu}{2\alpha' \bar{\mu}}.$$
 (27)

При цьому умова нормування параметра порядку φ (9) набуває вигляду

$$\bar{\mu} = \frac{\phi_1 \left(a - \mu\right)}{2\phi_0^*}.$$
(28)

Із виразу (28) слідує важлива властивість. Оскільки параметри a і μ згідно з (4) і (19) задають максимальні значення модуля зсуву, для опису однієї і тієї ж системи за допомогою двох моделей ці параметри повинні приймати однакові значення, що



Рис. 4. Залежності стаціонарного значення модуля зсуву μ_0 від пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$. Суцільними лініями показані залежності, що наведені на рис. 3, δ , символами показані залежності, проілюстровані на рис. 1, δ

з урахуванням виразу (28) приводить до величини $\bar{\mu} = 0$. Це не має фізичного сенсу, оскільки в такому випадку відповідно до виразу (19) ефективний модуль зсуву μ_{eff} не змінюється зі збільшенням надлишкового об'єму f. Зазначений факт приводить до висновку, що ці дві моделі межового тертя не можуть бути зведені одна до іншої абсолютно точно у всьому діапазоні керуючих параметрів, а умова $\bar{\mu} > 0$ приводить до необхідності виконання нерівності $a > \mu$. Із урахуванням цього були вибрані числові параметри, що містяться у підписах до рис. 1 і рис. 3.

Для подальшого дослідження параметри потенціалу $\Phi_{f \to \varphi}(\varphi)$ (26) доцільно вибрати такими, щоб вони максимально відповідали параметрам розвинення $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3), оскільки метою роботи є встановлення зв'язку між двома підходами до опису межового режиму тертя. В системі рівнянь (27) нам вже відомі величини a, b, α і T_c (див. параметри в підписах до рис. 1). Оскільки ми знаємо, що $\mu < a$, виберемо значення $\mu = 1.9 \cdot 10^{10}$ Па. Тепер система (27) містить 3 рівняння з 4-ма невідомими, що говорить про її надлишковість. Це пов'язано із тим, що потенціал Φ_{φ} (3) визначається у однорідному випадку чотирма сталими α , T_c , a i b. Потенціал $\Phi(f)$ (22) визначають п'ять сталих $\mu, \bar{\mu},$ ϕ_0^*, α' і ϕ_1 . Тому коли між потенціалами знаходиться відповідність (26), еквівалентні постійні (27) задаються таким чином, що один із параметрів повинен бути вибраний довільним чином. Приймемо $\phi_0^* = 1450 \ \text{Дж/м}^3$, що при розв'язанні системи (27) дозволить знайти всі параметри розвинення (26) (знайдені значення наведені в підписах до рис. 3).

Оскільки потенціал (26) відповідає виразу (22), стаціонарні значення модуля зсуву $\mu_{\rm eff,0}$ збігаються із залежностями, що показані на рис. 3. На рис. 4 суцільними лініями показані залежності, що відповідають потенціалу $\Phi_f(f)$ (22), які також наведені на рис. 3, б. Символами на рис. 4 позначені криві, що відповідають потенціалу $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3), які наведені на рис. 1, б. Як можна бачити, криві при температурах T_2 і T_3 ідеально співпадають, що говорить про можливості чисельно точного еквівалентного опису стаціонарних станів межового мастила при використанні обох моделей. Проте поведінка, що описується кривою при T_1 , істотно відрізняється. Це відбувається за рахунок того, що потенціал $\Phi_f(f)$ (22) описує фазовий перехід другого роду між нульовим і ненульовим значеннями надлишкового об'єму f. При підвищенні температури T або деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ від нульового значення до точки фазового переходу відповідно до виразу (19) значення модуля зсуву залишається незмінним ($\mu_{\text{eff}} = \mu$), оскільки реалізується нульове стаціонарне значення $f_0 = 0$ (див. криву при температурі T_1 на рис. 3). Після того як температура або деформація перевищують критичні значення, надлишковий об'єм стає відмінним від нуля і модуль зсуву $\mu_{\rm eff}$ з подальшим зростанням керуючих параметрів зменшується. Однак, криві при температурах T_2 і T_3 на рис. 4 показують зменшення модуля зсуву в усьому діапазоні керуючих параметрів. Це відбувається за рахунок того, що тут надлишковий об'єм $f_0 \neq 0$ при нульових деформаціях $\varepsilon_{\rm el}$ (див. рис. 3, *a*). При цьому зі зростанням керуючих параметрів у всьому їх діапазоні відповідно до виразу (19) модуль зсуву μ_{eff} зменшується. Таким чином при температурі, за якої при нульових деформаціях надлишковий об'єм має відмінне від нуля значення, обидві моделі абсолютно однаково описують стаціонарні стани мастильного матеріалу і між ними може бути встановлена точна відповідність. Повернемося до залежностей при температурі T₁ на рис. 4. Тут параметри $\mu = 1.9 \cdot 10^{10}$ Па і $a = 2 \cdot 10^{10}$ Па задають максимальні значення модуля зсуву. З рисунка слідує, що діапазон керуючих параметрів, в якому існує точна відповідність між моделями буде тим більшим, чим ближче знаходяться значення μ i a. Як ми це показали вище, завжди виконується нерівність $a > \mu$. Тому для відповідності моделей необхідно вибирати $\mu \rightarrow a$, з обов'язковим виконанням

нерівності $a > \mu$ (умова додатності виразу (28)). Тоді, як це можна бачити із рис. 4, відмінність між моделями буде спостерігатися тільки при температурах, близьких до нульового значення, які не мають практичної важливості. Більш того, розвинення вільної енергії записується для температур поблизу точки фазового переходу і при віддаленні від критичної температури T_c похибка такого опису істотно збільшується.

Зазначимо, що оскільки завжди $a > \mu$, то у випадку, коли потенціал $\Phi_{f\to\varphi}(\varphi)$ (26) дає стаціонарні значення параметра порядку φ близькі до 1 (при низьких температурах T), вираз (25) приводить до значень $f^2 < 1$, що відповідає негативному значенню під коренем у (23). Однак, додатково до стаціонарного значення (23) завжди існує стаціонарне значення $f_0 = 0$, яке і реалізується в цьому випадку. Йому відповідає постійна величина модуля зсуву $\mu_{\text{eff}} = \mu$ (див. (19)). Стаціонарне значення модуля зсуву μ_s визначається безпосередньо з виразу (26) і при зростанні керуючих параметрів буде зменшуватися, як це показано на рис. 1. Тому за низьких температур потенціали (26) і (22) показують різну поведінку. Однак, якщо використовуючи потенціал (26) завжди перевіряти зв'язок (25) і при $f^2 < 1$ приймати $f_0 = 0$, і відповідно $\varphi_0 = \sqrt{\mu/a}$, то при використанні (26) і (22) в обох випадках ми отримаємо однакову поведінку. Описане протиріччя викликано тим, що при підстановці виразу (25) у вільну енергію (22) частина потенціалу, що визначається останнім доданком при f^4 завжди позитивна, незалежно від значення f^2 в виразі (25). Більш того, якщо потенціал (22) дає постійне збільшення надлишкового об'єму зі збільшенням керуючих параметрів, то потенціал (26) при перевищенні критичних значень керуючих параметрів, після яких реалізується стаціонарне значення $\varphi_0 = 0$, згідно з (25) дає постійне значення надлишкового об'єму $f_0 = \sqrt{\mu/\bar{\mu}}$.

2.3.2. Перехід від модуляції густини до надлишкового об'єму

Вище ми знайшли вираз для вільної енергії $\Phi_{f\to\varphi}(\varphi)$ (26), що відповідає потенціалу $\Phi_f(f)$ (22), використовуючи зв'язок між параметрами порядку $f(\varphi)$ (25). Визначений у такий спосіб потенціал хоч і зводиться до форми $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3), все ж в деякому діапазоні параметрів (для низьких

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11

температур T) описує принципово інші властивості мастильного матеріалу. Тому цікавим також буде знаходження потенціалу як функції надлишкового об'єму f, виходячи з початкового розвинення $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3). Для цього використовуватимемо співвідношення (25), записане у вигляді

$$\varphi^2 = \frac{\mu}{a} - \frac{\bar{\mu}}{a} f^2. \tag{29}$$

При підстановці (29) в (3) матимемо потенціал

$$\Phi_{\varphi \to f} = \left[\frac{\alpha \mu \left(T - T_c \right)}{a} + \frac{b \mu^2}{4a^2} \right] + \frac{\mu}{2} \varepsilon_{\rm el}^2 + \left(\frac{\alpha \bar{\mu} \left(T_c - T \right)}{a} - \frac{\bar{\mu}}{2} \varepsilon_{\rm el}^2 - \frac{b \mu \bar{\mu}}{2a^2} \right) f^2 + \frac{b \bar{\mu}^2}{4a^2} f^4, \quad (30)$$

що еквівалентний виразу $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3). Вільна енергія (30) з точністю до сталої зводиться до потенціалу $\Phi_f(f)$ (22) при заміні змінних

$$\phi_0^* = \frac{\bar{\mu}}{a} \left(\alpha T_c - \frac{b\mu}{2a} \right); \quad \phi_1 = \frac{b\bar{\mu}^2}{a^2}; \quad \alpha' = \frac{\alpha\bar{\mu}}{a}, \quad (31)$$

причому розв'язок системи рівнянь (31) вже подано параметрами, які зазначені в підписах до рис. 1 і рис. 3, оскільки вони є розв'язком повністю еквівалентної системи рівнянь (27).

Потенціал (30) задає стаціонарне значення параметра порядку

$$f_0 = \sqrt{\frac{a^2 \varepsilon_{\rm el}^2 + 2\alpha a \left(T - T_c\right) + b\mu}{\bar{\mu}b}},\tag{32}$$

яке з урахуванням зв'язків (27) або (31) збігається з виразом (23). Більш того, із (32) при використанні зв'язку між параметрами порядку (25) (або еквівалентного виразу (29)) отримаємо (5). Зазначимо, що при підвищенні температури T від нульового значення в деякому діапазоні можлива ситуація, коли вираз під коренем у (32) є від'ємним. При цьому потенціал (30) має нульовий мінімум, а стаціонарне значення $f_0 = 0$, що згідно з (29) приводить до сталого значення модуляції густини φ_0 (див. криву при T_1 , що показана суцільною лінією на рис. 4). При цьому протиріч, подібних описаним вище, не виникає.

Оскільки потенціал $\Phi_{\varphi \to f}(f)$ (30) з точністю до сталої еквівалентний виразу $\Phi_f(f)$ (22), він визначає поведінку, яка аналогічна наведеній на рис. 3.

З іншого боку, цей потенціал відповідає виразу $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3), тому він також приводить до результатів, які продемонстровані на рис. 1. Таким чином, вирази для вільної енергії $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3), $\Phi_{f}(f)$ (22), $\Phi_{f \to \varphi}(\varphi)$ (26) і $\Phi_{\varphi \to f}(f)$ (30) описують одні і ті самі стаціонарні стани межового мастила. Відмінності у поведінці, що вказані на рис. 4, реалізуються лише за низьких температур та викликані різними значеннями параметрів розвинення a та μ , оскільки завжди $a > \mu$ (див. формулу (28) і пояснення до неї). Більш того, можна легко визначити температуру мастильного матеріалу T, при перевищенні якої обидві моделі є еквівалентними. Для цього необхідно виконання умови додатності виразів під коренем у (23) і (32) за відсутності деформації $\varepsilon_{\rm el} = 0$. Вказані вирази додатні, якщо температура мастила Т вища за критичне значення

$$T > T^* = \frac{\phi_0^*}{\alpha'}.\tag{33}$$

При виконанні нерівності (33) обидві розглянуті в роботі моделі показують однакові результати у всьому діапазоні керуючих параметрів. Це твердження відповідно до останнього виразу в (27) (при фіксованому значенні T_c) узгоджується з тим, що для збільшення ширини діапазону, в якому моделі дають однакові результати, необхідно, щоб параметр μ за значенням був якомога ближче до a. При параметрах розвинення, які використані у цій роботі, маємо значення $T^* = 14,5$ К.

2.4. Вплив зовнішнього навантаження

Проведене вище дослідження говорить про те, що використовуючи як параметри порядку модуляцію густини φ або надлишковий об'єм f, можна однаково описати процес межового тертя. Більш універсальною є перша модель (вираз $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3)), оскільки вона справедлива у всьому діапазоні керуючих параметрів, тому в ній не потрібно вводити додаткові умови. Однак, суттєвим недоліком цієї моделі є те, що вона не враховує вплив зовнішнього навантаження, а це дуже важливо в даній проблемі, оскільки зовнішнє навантаження може змінювати поведінку трибологічних систем критичним чином [4]. Той факт, що при відсутності зовнішнього навантаження ($n = 0 \Pi a$) можна однаково описати процес межового тертя за допомогою обох моделей, приводить до думки про існування

відповідності між підходами, що дозволяє модифікувати модель, яка заснована на потенціалі $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ таким чином, щоб вона враховувала вплив зовнішнього навантаження на поверхні тертя. Знайдемо таку відповідність. Спершу запишемо потенціал $\Phi_f(f)$ (15) при $n \neq 0$ у простішому вигляді. Згідно з виразами (17) і (21) другий інваріант тензора деформації може бути виражений через перший інваріант як

$$\left(\varepsilon_{ij}^{\rm el}\right)^2 = \frac{\varepsilon_{\rm el}^2 + \left(\varepsilon_{ii}^{\rm el}\right)^2}{2},\tag{34}$$

де $\varepsilon_{\rm el}$ – пружна компонента деформації, яка в моделі є керуючим параметром. Після підстановки виразу (34) у вільну енергію (15) отримаємо

$$\Phi_f = \frac{\mu}{2}\varepsilon_{\rm el}^2 + \frac{\lambda + \mu}{2} \left(\varepsilon_{ii}^{\rm el}\right)^2 + \left[\phi_0^* - \frac{\bar{\mu}}{2}\varepsilon_{\rm el}^2 - \frac{\bar{\lambda} + \bar{\mu}}{2} \left(\varepsilon_{ii}^{\rm el}\right)^2 - \alpha' T\right] f^2 + \frac{1}{4}\phi_1 f^4.$$
(35)

Розглянемо на прикладі потенціалу (35) перехід від параметра порядку f до параметра порядку φ у загальному випадку, коли зовнішні нормальні напруження n не дорівнюють нулю.

Підстановка співвідношень (25), (16), (19) і (20) в потенціал (35) приводить до виразу

$$\Phi_{f \to \varphi, n} = \Phi_{f \to \varphi} \left(\varphi\right) + \frac{n^2 \bar{\mu}/2}{\bar{\mu}\lambda - \bar{\lambda}\mu + a\varphi^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})}, \quad (36)$$

де $\Phi_{f\to\varphi}(\varphi)$ визначається формулою (26). У відсутності зовнішнього навантаження (n = 0 Па) при використанні зв'язків (27) потенціал (36) з точністю до сталої зводиться до $\Phi_{\varphi}(\varphi)$ (3). Таким чином, вираз (36) узагальнює запропоновану в роботах [10,18,19] модель, оскільки додатково враховує зовнішнє навантаження, що прикладено до поверхонь. При знаходженні стаціонарних значень параметра порядку і модуля зсуву безпосередньо із виразу (36), матимемо криві, що показані символами на рис. 4, у всьому діапазоні керуючих параметрів, без необхідності введення додаткових умов і обмежень.

На рис. 5, *а* показані залежності потенціалу $\Phi_{f\to\varphi,n}$ (36) від параметра порядку φ для різних значень зовнішнього навантаження, рівень якого зростає від n_1 до n_5 . Причому значення навантаження $n_1 = 0$ Па, а потенціал (36) в цьому ви-

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11

падку зводиться до $\Phi_{f\to\varphi}(\varphi)$ (26). З рисунка слідує, що зі зростанням зовнішнього навантаження збільшується стаціонарне значення параметра порядку φ_0 , що відповідає мінімуму потенціалу $\Phi_{f \to \varphi, n}$ (36) (див. також рис. 5, б), що відповідно до виразу (6) приводить до збільшення модуля зсуву мастильного матеріалу $\mu_{s,0}$, тобто мастило стає більш твердоподібним. Фізично це викликано тим, що зростання зовнішнього навантаження приводить до вимушеного упорядкування молекул мастильного шару [4]. Варто зазначити, що при параметрах кривих, які побудовані при значеннях температур T_4 і T_5 на рис. 5, б зі зростанням абсолютного значення зовнішніх нормальних напружень *n* спостерігається фазовий перехід другого роду між нульовим (рідиноподібна структура) і ненульовим (твердоподібна структура) стаціонарними значеннями параметра порядку φ_0 . При температурах T_1 , T_2 i T_3 вже при нульовому навантаженні n = 0 Па мастильний матеріал знаходиться в твердоподібному стані, оскільки $\varphi_0 \neq 0$ при n = 0 Па. Таким чином, модель (36) враховує вплив температури T, пружних деформацій $\varepsilon_{\rm el}$ і зовнішнього навантаження n, набір значень яких визначає фазовий стан мастильного матеріалу. В роботах [23, 24, 26, 27] було отримано співвідношення, що зв'язує пружну деформацію в змащувальному шарі з відносною швидкістю руху поверхонь, що труться. Таким чином, нами проведено врахування основних керуючих параметрів, які задають режими тертя.

Зазначимо, що потенціал (36) може бути зведений до поліноміального вигляду, якщо розвинути в ряд доданок, що враховує зовнішнє навантаження:

$$\frac{\frac{n^2 \bar{\mu}/2}{\bar{\mu}\lambda - \bar{\lambda}\mu + a\varphi^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})} = \\
= \frac{n^2 \bar{\mu}}{2\left(\bar{\mu}\lambda - \bar{\lambda}\mu\right)} \sum_{m=0}^{\infty} \left[\frac{-a(\bar{\lambda} + \bar{\mu})\varphi^2}{(\bar{\mu}\lambda - \bar{\lambda}\mu)}\right]^m.$$
(37)

Однак, при цьому варто враховувати, що ряд (37) збігається лише за виконання умови

$$\varphi < \varphi_c = \sqrt{\frac{\bar{\mu}\lambda - \bar{\lambda}\mu}{a\left(\bar{\lambda} + \bar{\mu}\right)}},\tag{38}$$

де при вибраних параметрах моделі критичне значення параметра порядку $\varphi_c = \sqrt{30030}/260 \approx 0.667$. Зазначимо, що згідно із (38) можливо підібрати





Рис. 5. Залежності вільної енергії $\Phi_{f\to\varphi,n}$ (36) від параметра порядку φ при параметрах рис. 1 і рис. 3, а також $\lambda = 10^{10}$ Па, $\bar{\lambda} = 10^{11}$ Па, пружних деформаціях $\varepsilon_{\rm el} = 0$ і температурі мастильного матеріалу T = 300 К (*a*). Криві n_1-n_5 відповідають значенням нормальних напружень n = 0, -1, 2, -1, 7, -2, 1, -2, 4 МПа; залежності стаціонарних значень параметра порядку φ_0 від зовнішніх нормальних напружень – *n*, що відповідають потенціалу (36), при параметрах рис. 5, *a* (δ). Криві T_1-T_5 відповідають температурам T = 100, 200, 250, 300 і 400 К відповідно



Puc. 6. Механічний аналог трибологічної системи

параметри моделі таким чином, щоб діапазон збіжності був набагато ширшим (наприклад, збільшивши значення параметра λ). Однак, оскільки у нас є точний вираз для потенціалу $\Phi_{f \to \varphi, n} (\varphi)$ (36), використання (37) не є обов'язковим.

3. Кінетика трибологічної системи

Розглянемо механічний аналог трибологічної системи, що показаний на рис. 6. Пружина з жорсткістю *K* пов'язана з блоком масою *M*. Блок розташований на гладкій поверхні, від якої відділений

шаром мастила товщиною h. Вільний кінець пружини приводиться в рух з фіксованою швидкістю V_0 . При русі блока виникає сила тертя F, що чинить опір його пересуванню. Позначимо поточну координату верхнього блока X, тоді відповідне рівняння руху має вигляд [10, 35]:

$$M\ddot{X} = K\left(V_0 t - X\right) - F.$$
(39)

У рівнянні (39) фігурує сила тертя F, яка може бути знайдена при використанні описаних вище моделей. Для цього потрібний зв'язок між швидкістю зсуву V і пружними деформаціями, що виникають в шарі мастила. Скористаємося дебаєвським наближенням, що зв'язує пружну компоненту деформації $\varepsilon_{\rm el}$ з пластичною $\varepsilon_{\rm pl}$ [10]:

$$\dot{\varepsilon}_{\rm pl} = \frac{\varepsilon_{\rm el}}{\tau_{\varepsilon}},\tag{40}$$

де введений час релаксації τ_{ε} . Повна деформація в змащувальному шарі складається з пружної і пластичної компонент

$$\varepsilon = \varepsilon_{\rm el} + \varepsilon_{\rm pl}$$
 (41)

і задає швидкість руху верхнього блока V згідно з зв'язком [36]:

$$V = h\dot{\varepsilon} = h(\dot{\varepsilon}_{\rm el} + \dot{\varepsilon}_{\rm pl}). \tag{42}$$

Із трьох останніх співвідношень слідує вираз для пружної компоненти зсувної деформації у вигляді

$$\tau_{\varepsilon} \dot{\varepsilon}_{\rm el} = -\varepsilon_{\rm el} + \frac{V \tau_{\varepsilon}}{h}.$$
(43)

Як правило, час релаксації τ_{ε} дуже малий, що дозволяє в рамках наближення $\tau_{\varepsilon}\dot{\varepsilon}_{el} \approx 0$ з достатньою точністю використовувати стаціонарне значення пружної деформації:

$$\varepsilon_{\rm el} = \frac{V\tau_{\varepsilon}}{h}.\tag{44}$$

Вираз (44) свідчить про те, що пружна деформація $\varepsilon_{\rm el}$ в змащувальному шарі з постійною товщиною *h* задається відносною швидкістю руху блоків *V*. У стані спокою (*V* = 0 м/с) пружні деформації дорівнюють нулю, оскільки відсутнє зовнішнє збурення системи. Сила тертя, що діє в системі, яка наведена на рис. 6, визначається як добуток повних напружень і площі контакту поверхонь, що труться *A*:

$$F = (\sigma_{\rm el} + \sigma_v) A, \tag{45}$$

де в'язкі напруження σ_v визначаються відповідно до формули [36]:

$$\tau_v = \frac{\eta_{\text{eff}} V}{h},\tag{46}$$

а ефективна в'язкість мастильного матеріалу η_{eff} визначається залежністю, яка була отримана експериментально [36]:

$$\eta_{\rm eff} = k \left(\dot{\varepsilon} \right)^{\gamma}. \tag{47}$$

У виразі (47) введений коефіцієнт пропорційності k (Па · c^{γ +1}). Для псевдопластичних рідин $\gamma < 0$, ділатантні характеризуються показником $\gamma > 0$, а у випадку ньютонівських рідин $\gamma = 0$, оскільки згідно із (47) і (42) при цьому в'язкість не залежить від градієнта швидкості.

З урахуванням (42), (47) вираз для в'язких напружень (46) записується у вигляді

$$\sigma_v = k \left(\frac{V}{h}\right)^{\gamma+1}.$$
(48)

Підставляючи (48) в (45), отримуємо остаточний вираз для сили тертя [23]²:

$$F = \left[\sigma_{\rm el} + k\,{\rm sgn}(V)\left(\frac{|V|}{h}\right)^{\gamma+1}\right]A,\tag{49}$$

де пружні напруження $\sigma_{\rm el}$ визначаються виразами (4) або (21), в залежності від моделі, що використовується.

3.1. Надлишковий об'єм як параметр порядку

Для опису поведінки мастила запишемо кінетичне релаксаційне рівняння типу Ландау–Халатнікова [37]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} = -\delta \frac{\partial \Phi}{\partial x},\tag{50}$$

де x – параметр порядку, а кінетичний коефіцієнт δ характеризує інерційні властивості системи. Розглянемо спочатку ситуацію, в якій в ролі параметра порядку використовується надлишковий об'єм f. Після підстановки в (50) вільної енергії $\Phi_f(f)$

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2021. Т. 66, № 11

² Тут введені знакова функція sgn(x) і абсолютне значення швидкості зсуву |V|, оскільки вона може приймати від'ємні значення.

(35) це рівняння при $x \equiv f$ запишеться в явному вигляді

$$\frac{1}{\delta} \frac{\partial f}{\partial t} = -f \left[2\phi_0^* - \bar{\mu} \left(\frac{V\tau_{\varepsilon}}{h} \right)^2 - 2\alpha' T \right] - \phi_1 f^3 - \frac{n^2 f \left(\bar{\lambda} + \bar{\mu} \right)}{\left[\lambda + \mu - f^2 \left(\bar{\lambda} + \bar{\mu} \right) \right]^2},$$
(51)

де використаний зв'язок між відносною швидкістю зсуву поверхонь, що труться V і пружною деформацією в змащувальному шарі $\varepsilon_{\rm el}$ (44). Рівняння (51) говорить про те, що збільшення зовнішнього навантаження (абсолютного значення нормальних напружень n) приводить до вимушеного упорядкування мастильного матеріалу, оскільки надлишковий об'єм f при цьому зменшується. Для обчислення часової еволюції головних параметрів трибологічної системи, що показана на рис. 6, будемо розв'язувати чисельно систему кінетичних рівнянь (39) і (51), визначаючи силу тертя F з (49), а пружні напруження $\sigma_{\rm el} \equiv \tau$ згідно з виразом (21)³. Також необхідно враховувати зв'язок $\dot{X} = V$. Для розв'язування зазначеної системи рівнянь ми використовували методи Ейлера і Рунге-Кутта 4 порядку точності. Обидва методи приводять до однакових результатів.

На рис. 7 показані чисельно розраховані залежності сили тертя F, швидкості руху верхнього блока V, його координати X, натягу пружини ΔX , а також пружних напружень τ , що виникають в шарі мастила. З рисунка слідує, що в системі встановлюється переривчастий режим межового тертя, в якому здійснюються періодичні фазові переходи між твердоподібним і рідиноподібним структурними станами мастильного матеріалу. Докладно особливості такого типу переривчастого режиму руху, а також причини, що приводять до нього, розглянуті в роботі [23], у рамках моделі фазового переходу першого роду.

На рис. 8 додатково наведені залежності від часу t параметрів порядку надлишкового об'єму f(наведена на графіку залежність обрізана згори)



Рис. 7. Залежності сили тертя *F* (49), швидкості зсуву верхнього блока *V*, його координати *X*, довжини розтягу пружини $\Delta X = V_0 t - X$ і пружних зсувних напружень $\sigma_{\rm el}$ від часу *t* при параметрах рис. 1, рис. 3, рис. 5 і M = 0,4 кг, K = 1500 H/м, $\delta = 100$ Па⁻¹·c⁻¹, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_{\varepsilon} = 10^{-7}$ с, $A = 5 \cdot 10^{-9}$ м², $\gamma = -2/3$, $k = 5 \cdot 10^3$ Па·c^{1/3}, T = 250 K, $V_0 = 500$ нм/с і n = -0,3 МПа

і модуляції густини φ , які відповідають залежностям, що показані на рис. 7. З рисунка слідує, що в системі дійсно здійснюються фазові переходи, причому зі збільшенням надлишкового об'єму модуляція густини зменшується.

3.2. Модуляція густини як параметр порядку

Підставляючи в рівняння (50) вільну енергію $(36)^4$, отримаємо кінетичне рівняння в явному

³ Оскільки модель не обмежує значення надлишкового об'єму f, згідно з (19) при виконанні умови $f > \sqrt{\mu/\bar{\mu}}$ необхідно приймати $\mu_{\rm eff} = 0$. При цьому параметри λ і $\bar{\lambda}$ слід вибирати таким чином, щоб для всіх значень параметра порядку f, які реалізуються, завжди виконувалась умова $\lambda_{\rm eff} > 0$.

⁴ Вираз (36) подає вільну енергію Φ_φ (3), з урахуванням доданка, що описує зовнішнє навантаження, яке пропорційно величині n².



Рис. 8. Залежності параметрів порядку φ і f від часу t, що відповідають залежностям, які наведені на рис. 7

вигляді

$$\frac{1}{\delta} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\varphi \left[2\alpha \left(T - T_c \right) + a \left(\frac{V \tau_{\varepsilon}}{h} \right)^2 \right] - b\varphi^3 + \frac{n^2 \bar{\mu} a \varphi \left(\bar{\lambda} + \bar{\mu} \right)}{\left[\bar{\mu} \lambda - \bar{\lambda} \mu + a \varphi^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu}) \right]^2}.$$
(52)

Для моделювання процесу плавлення мастила необхідно діяти за схемою, що аналогічна до описаної в попередньому підрозділі роботи, з тією відмінністю, що замість рівняння (51) необхідно використовувати (52). Пружні напруження $\sigma_{\rm el}$, що входять у вираз для сили тертя F (49), при цьому визначаються за виразом (4). Однак, при використанні рівняння (52) є одна важлива деталь. Справа в тому, що при чисельному інтегруванні рівняння (52) його корінь $\varphi = 0$ є стійким навіть тоді, коли відповідає максимуму потенціалу $\Phi_{\varphi}(\varphi)$. В роботі [23] щоб уникнути такої ситуації в рівняння (52) додатково вводився адитивний шум з малою інтенсивністю. Дія такого шуму приводить до того, що в описаній ситуації $\varphi = 0$ система з нестійкого стану перейде в стійкий, що відповідає мінімуму енергії. Таким чином, врахування флуктуацій необхідне через особливості чисельного розрахунку. При інтегруванні рівняння (51) таких проблем не виникає

4. Висновки

В роботі проведено узагальнення запропонованої В.Л. Поповим термодинамічної теорії структурних станів межового тертя. Узагальнення полягає в тому, що в модель природним чином введене навантаження на тертьові поверхні, яке задається через величину зовнішніх нормальних напружень. Показано, що зростання нормальних напружень приводить до збільшення стаціонарних значень параметра порядку модуляції густини і модуля зсуву мастильного матеріалу. Плавлення мастила може здійснюватися при підвищенні його температури, збільшення пружної компоненти деформації, що виникає в змащувальному шарі при зсуві, а також при зменшенні зовнішнього навантаження. Модель, описана в роботі, узагальнює отримані раніше результати при дослідженні кінетики межового тертя у випадку відсутності зовнішнього навантаження. Оскільки в експериментах по межовому тертю навантаження на поверхні часто впливає критичним чином, а запропоноване узагальнення дозволяє описувати вплив навантаження, робота може бути основою для проведення подальших теоретичних досліджень.

Автор вдячний д.ф.-м.н., професору С.І. Денисову за детальний аналіз дисертаційної роботи [17], в ході якого виникла ідея встановити зв'язок між двома теоретичними підходами опису межового тертя, який міститься в запропонованій роботі для випадку фазового переходу другого роду. Також вдячний д.ф.-м.н., професору В.Л. Попову і д.ф.-м.н., професору А.Е. Філіппову за обговорення результатів роботи і ряд критичних зауважень і пропозицій, які дозволили суттево її покращити.

Робота містить результати досліджень, що проведені при виконанні стипендіальної роботи в рамках іменної стипендії Верховної Ради України для молодих вчених – докторів наук (Постанова Верховної Ради України від 14.07.2021 р. No. 1641-IX).

ДОДАТОК А: Визначення інваріантів тензора деформації

Закон Гука для ізотропного тіла записується у вигляді [33]:

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{ii} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}. \tag{A1}$$

Виберемо головні вісі деформації у ролі координатних осей, тоді тензор деформацій ε_{ij} матимете тільки діагональні компоненти. Розглянемо плоско деформований стан мастила, у якому $\varepsilon_{22} = 0$. Діагональні компоненти тензора на-

1004

пружень у такій системі координат:

 $\sigma_1 = \lambda \left(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33} \right) + 2\mu \varepsilon_{11}, \tag{A2}$

 $\sigma_2 = \lambda \left(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33} \right),\tag{A3}$

 $\sigma_3 = \lambda \left(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33} \right) + 2\mu \varepsilon_{33}. \tag{A4}$

Уздовж межі мастила діють дотичні напруження [34]

$$\tau_2 = \frac{\sigma_3 - \sigma_1}{2} = \mu \left(\varepsilon_{33} - \varepsilon_{11} \right), \tag{A5}$$

а нормальне до межі мастила напруження становить [34]

$$n_2 = \frac{\sigma_3 + \sigma_1}{2} = (\lambda + \mu) \left(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33}\right),\tag{A6}$$

Тоді із (А5) і (А6) матимемо

$$\varepsilon_{11} = \frac{1}{2} \left(\frac{n_2}{\lambda + \mu} - \frac{\tau_2}{\mu} \right),\tag{A7}$$

$$\varepsilon_{33} = \frac{1}{2} \left(\frac{n_2}{\lambda + \mu} + \frac{\tau_2}{\mu} \right). \tag{A8}$$

Відповідно перші два інваріанти тензора деформації (16) і (17) визначатимуться як

$$\varepsilon_{ii} = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33} = \frac{n_2}{\lambda + \mu},\tag{A9}$$

$$\varepsilon_{ij}\varepsilon_{ji} = \varepsilon_{11}^2 + \varepsilon_{22}^2 + \varepsilon_{33}^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau_2}{\mu} \right)^2 + (\varepsilon_{ii})^2 \right].$$
(A10)

- M. Shisode, J. Hazrati, T. Mishra, M. de Rooij, C. ten Horn, J. van Beeck, T. van den Boogaard. Modeling boundary friction of coated sheets in sheet metal forming. *Tribol. Int.* **153**, 106554 (2021).
- R.I. Taylor, N. Morgan, R. Mainwaring, T. Davenport. How much mixed/boundary friction is there in an engine – and where is it? *Proc. Inst. Mech. Eng. J* 234, 1563 (2020).
- J. Zhang, Y. Meng. Boundary lubrication by adsorption film. Friction 3, 115 (2015).
- H. Yoshizawa, J. Israelachvili. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-slip friction of spherical and chain molecules. J. Phys. Chem. 97, 11300 (1993).
- O.M. Braun, A.G. Naumovets. Nanotribology: Microscopic mechanisms of friction. Surf. Sci. Rep. 60, 79 (2006).
- J.N. Israelachvili. Intermolecular and Surface Forces. 3-rd edition (Academic Press, 2011).
- B.N.J. Persson. Theory of friction: The role of elasticity in boundary lubrication. *Phys. Rev. B* 50, 4771 (1994).
- A.E. Filippov, J. Klafter, M. Urbakh. Friction through dynamical formation and rupture of molecular bonds. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 135503 (2004).
- I.A. Lyashenko, V.N. Borysiuk, N.N. Manko. Statistical analysis of self-similar behaviour in the shear induced melting model. *Cond. Matt. Phys.* 17, 23003 (2014).
- V.L. Popov. Thermodynamics and kinetics of shear-induced melting of a thin layer of lubricant confined between solids. *Tech. Phys.* **71**, 605 (2001).

- F. Porcheron, B. Rousseau, M. Schoen, A.H. Fuchs. Structure and solvation forces in confined alkane films. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 3, 1155 (2001).
- 12. M. Schoen, F. Porcheron. Collective dynamics near a phase transition in confined fluids. *Eur. Phys. J. E* **12**, 5 (2003).
- M. Schoen, F. Porcheron. Collective dynamics near fluid phase transitions. *Phys. Rev. E* 67, 051202 (2003).
- P. Bryk, R. Roth, M. Schoen, S. Dietrich. Depletion potentials near geometrically structured substrates. *Europhys. Lett.* 63, 233 (2003).
- S. Sacquin, M. Schoen, A.H. Fuchs. Fluid phase transitions at chemically heterogeneous, nonplanar solid substrates: Surface versus confinement effects. J. Chem. Phys. 118, 1453 (2003).
- H. Bock, M. Schoen. Thermomechanical properties of confined fluids exposed to a shear strain J. Phys.: Condens. Matter 12, 1545 (2000).
- Я.А. Ляшенко. Фазовые переходы между кинетическими режимами граничного трения. дис. докт. физ.мат. наук: 01.04.07 – физика твердого тела (СумГУ, 2016).
- Г.П. Остермайер, В.Л. Попов. Описание индуцированных температурой и сдвигом переходов "твердое тело– жидкость" методом мезочастиц. *Физ. мезомех.* 3 (5), 33 (2000).
- V.L. Popov. A theory of the transition from static to kinetic friction in boundary lubrication layers. *Solid State Commun.* 115, 369 (2000).
- V.L. Popov. Thermomechanical model of crystalline elastoplastic media. *Tech. Phys. Lett.* 25, 815 (1999).
- Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Статистическая физика. Часть 1 (Наука, 2010) [ISBN: 978-5-9221-0054-0].
- D.F. Kienle, T.L. Kuhl. Density and phase state of a confined nonpolar fluid. *Phys. Rev. Lett.* **117**, 036101 (2016).
- I.A. Lyashenko. First-order phase transition between the liquidlike and solidlike structures of a boundary lubricant. *Tech. Phys.* 57, 17 (2012).
- I.A. Lyashenko. Effect of the temperature dependence of the viscosity of pseudoplastic lubricants on the boundary friction regime. *Tech. Phys.* 58, 1016 (2013).
- I.A. Lyashenko, A.E. Filippov, M. Popov, V.L. Popov. Effect of stress nonhomogeneity on the shear melting of a thin boundary lubrication layer. *Phys. Rev. E* 94, 053002 (2016).
- Я.А. Ляшенко, А.В. Хоменко, Л.С. Метлов. Гистерезисные явления граничного трения. ФТВД 21, 67 (2011).
- I.A. Lyashenko, A.V. Khomenko, L.S. Metlov. Nonlinear thermodynamic model of boundary friction. J. Frict. Wear 32, 113 (2011).
- E. Popova, V.L. Popov. Ludwig Föppl and Gerhard Schubert: Unknown classics of contact mechanics. Z. Angew. Math. Mech. – ZAMM 100, e202000203 (2020).
- Yu. Holovatch (editor). Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory (World Scientific, 2018), Vol. 5.

- 30. G. Reiter, A.L. Demirel, J. Peanasky *et al.* The solid-like state of a confined liquid lubricant: Deformation and time effects. In: *Physics of Sliding Friction.* Ed. by B.N.J. Persson, E. Tosatti (Kluwer, 1996), pp. 119–138.
- A. Lemaître, J. Carlson. Boundary lubrication with a glassy interface. *Phys. Rev. E* 69, 061611 (2004).
- A. Lemaître. Rearrangements and dilatancy for sheared dense materials. *Phys. Rev. Lett.* 89, 195503 (2002).
- Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Теория упругости (Физматлит, 2007) [ISBN: 5-9221-0122-6].
- 34. Л.М. Качанов. Основы теории пластичности (Наука, 1969) [ISBN: 5458436059].
- I.A. Lyashenko, V.N. Borysiuk, V.L. Popov. Dynamical model of the asymmetric actuator of directional motion based on power-law graded materials. *FU. Ser. Mech. Eng.* 18, 245 (2020).
- G. Luengo, J. Israelachvili, S. Granick. Generalized effects in confined fluids: new friction map for boundary lubrication. *Wear* 200, 328 (1996).
- Л.Д. Ландау, И.М. Халатников. Об аномальном поглощении звука вблизи точек фазового перехода второго рода. ДАН СССР 96, 469 (1954).
 Одержано 04.04.21

I.A. Lyashenko

DESCRIPTION OF THE STATIONARY STRUCTURAL STATES OF A BOUNDARY LUBRICANT MAKING USE OF THE RELATION BETWEEN THE DENSITY-MODULATION AND EXCESS-VOLUME ORDER PARAMETERS

A second-order phase transition between the structural states of a boundary lubricant sandwiched between atomically smooth solid surfaces has been described in the framework of the Landau theory of phase transitions, by using the density modulation and the excess volume as the order parameters. A relation between those order parameters is found. The stationary states of a lubricant and their dependences on such control parameters as the lubricant temperature, the elastic strain in the lubricant layer, and the external load on the friction surfaces are studied. The melting kinetics was simulated in the framework of a mechanical analog of the tribological system with elasticity.

Keywords: boundary lubricant, friction force, stick-slip mode, order parameter, phase transition.