

УДК 621.891

НЕРАВНОВЕСНАЯ КИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В РЕЖИМЕ ГРАНИЧНОГО ТРЕНИЯЯ. А. ЛЯШЕНКО^{а+}, Л. С. МЕТЛОВ^б, А. В. ХОМЕНКО^а, С. Н. ЧЕПУЛЬСКИЙ^а

Предложена неравновесная эволюционная термодинамическая модель, описывающая процессы, происходящие в режиме граничного трения. Для описания состояния смазочного материала введен параметр избыточного объема, имеющий минимальное значение при твердopodobной структуре смазочного материала, и увеличивающий свое значение при плавлении. Учтен источник роста энтропии системы, связанный с внешним притоком энергии при деформировании смазочного материала в результате сдвига трущихся поверхностей. Показано, что в широком диапазоне параметров реализуется прерывистый режим движения, к которому приводят периодические фазовые переходы первого рода между структурными состояниями смазочного материала. Исследовано влияние скорости сдвига, нагрузки и температуры на характер прерывистого трения.

Ключевые слова: смазочный материал, сила трения, сдвиговые напряжения и деформации, энтропия, внутренняя энергия, фазовый переход, прерывистый режим.

Введение. Одним из прикладных междисциплинарных направлений в науке является нанотрибология [1], связанная с изучением на атомарном уровне процессов адгезии, трения, износа, а также разрушения трущихся поверхностей. Важной задачей в этой области является объяснение и моделирование процессов трения на наномасштабах. Предметами изучения в нанотрибологии являются процессы сцепления и скольжения контактирующих поверхностей [2, 3], влияние на трение пленки смазочного материала (СМ) нанометровой толщины [1, 2, 4], механические свойства контактов [5, 6] и т. д.

Большое внимание привлекают эффекты периодического сцепления и последующего скольжения трущихся поверхностей, что приводит к неравномерности их относительного движения (stick-slip) [7–9]. Такой режим скольжения в основном проявляется при сухом трении [10–12], а также при граничном трении, когда слой СМ имеет толщину порядка нескольких атомарных диаметров [1, 2, 4, 5, 7–9, 13]. При наличии шероховатостей между трущимися поверхностями прерывистый режим граничного трения объясняется следующим образом: в некоторый момент выступы трущихся поверхностей слипаются в результате адгезии или капиллярных сил, а для их последующего отрыва необходимо, чтобы возникающие механические напряжения превышали критическое значение. Как правило, параметры прерывистого режима существенно зависят от скорости движения, температуры СМ, от приложенной к поверхностям нагрузки и т. д. Например, при достижении некоторой критической скорости скольжения эффект пропадает, и сила трения становится регулярной.

Экспериментально наблюдаемые процессы, происходящие в режиме граничного трения, более разнообразны, чем в объемных системах, и проявляют множество принципиально новых явлений, не объяснимых с точки зрения классической науки [7]. Как правило, граничный СМ обеспечивает несколько кинетических режимов, между которыми в процессе трения происходят скачкообразные фазовые переходы, обеспечивая сложный вид кинетических зависимостей параметров систе-

а Сумский государственный университет. Украина, 40007, г. Сумы, ул. Римского-Корсакова, 2.

б Донецкий физико-технический институт им. А. А. Галкина НАН Украины. Украина, 83114, г. Донецк, ул. Розы Люксембург, 72.

+ Автор, с которым следует вести переписку. e-mail: nabla04@ukr.net.

мы [7, 14]. Обычно выделяют три основных режима: скольжение при малых скоростях сдвига, регулярный прерывистый режим и скольжение при больших скоростях сдвига. Эти режимы найдены экспериментально [2, 7, 15], а затем объяснены теоретически [13].

Ранее для описания граничного трения предложена модель, которая базируется на представлениях вязкоупругой среды [16–20]. С ее помощью удалось описать термодинамическое и сдвиговое плавление. Учет флуктуаций основных параметров системы [16–19] позволил объяснить причины гистерезиса [20], наблюдаемого в экспериментах [21–23], а также описать периодический прерывистый режим трения [17]. Однако такой режим согласно модели имеет выраженную стохастическую (трендовую) составляющую, в то время как в экспериментах он, как правило, имеет периодический характер с постоянной частотой и амплитудой. Для устранения этого “недостатка” предложена детерминистическая теория, описывающая трение атомарно-гладких твердых поверхностей при наличии ультратонкого слоя СМ между ними [24–26]. В ней для описания состояния СМ используется параметр избыточного объема (параметр беспорядка), характеризующий хаотизацию структуры СМ в процессе плавления. Это позволило единообразно описать термодинамическое и сдвиговое плавление, проанализировать зависимость стационарной силы трения от температуры СМ и относительной скорости сдвига трущихся поверхностей при их равномерном сдвиге с постоянной скоростью, а также описать прерывистый режим трения в рамках механического аналога простой трибологической системы. Настоящая работа направлена на дальнейшее развитие этой теории для описания неравновесных процессов, протекающих в такого рода трибологических системах. Для учета неравновесных процессов введена неравновесная энтропия, описывающая часть теплового движения, обусловленного неравновесным характером теплового распределения. Полагается, что равновесная энтропия постоянно пополняется за счет перехода неравновесной энтропии в равновесную подсистему. В статье проанализировано влияние внешнего нормального давления на характер плавления СМ. Описан прерывистый режим плавления, наблюдающийся в экспериментах. Показано, что с ростом скорости сдвига частота пиков прилипания в прерывистом режиме сначала увеличивается, затем уменьшается, и далее наступает режим скольжения, характеризуемый постоянным значением силы трения.

Основные уравнения и фазовая диаграмма. Запишем разложение для объемной плотности внутренней энергии u по параметру f с учетом вкладов от упругих компонент сдвиговых деформаций ε_{ij}^e , равновесной энтропии s , а также неравновесной энтропии \tilde{s} в виде [4, 27]:

$$u = u_0 + t_0 \tilde{s} - \frac{1}{2} t_1 \tilde{s}^2 + \phi_0 f^2 - \frac{1}{4} \phi_1 f^4 + \frac{1}{6} \phi_2 f^6, \quad (1)$$

где величина f^2 представляет избыточный объем, нулевое значение которого отвечает твердopodobной структуре СМ, а ненулевое — жидкоподобной [4, 24, 27]. Здесь младшие параметры разложения u_0, ϕ_0 и t_0 являются функциями первых двух инвариантов тензора упругой деформации ε_{ii}^e и $\varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$, а также энтропии s :

$$u_0 = u_0^* + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e + \alpha s^2, \quad (2)$$

$$\phi_0 = \phi_0^* - \frac{1}{2} \bar{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e - \alpha_\phi s^2, \quad (3)$$

$$t_0 = t_0^* + \frac{1}{2} \tilde{\lambda} (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \tilde{\mu} \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e. \quad (4)$$

Упругие напряжения σ_{ij}^e , возникающие в слое СМ, можно представить, используя выражение для внутренней энергии (1):

$$\frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{ij}^e} \equiv \sigma_{ij}^e = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f^2 + (\tilde{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\tilde{\mu} \varepsilon_{ij}^e) \tilde{s}, \quad (5)$$

где ε_{ij}^e — сдвиговая компонента упругой деформации. Последнее выражение сводится к эффективному закону Гука [24, 28]

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu_{eff}\varepsilon_{ij}^e + \lambda_{eff}\varepsilon_{ii}^e\delta_{ij} \quad (6)$$

с эффективными упругими параметрами

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu}f^2 + \tilde{\mu}\tilde{s}, \quad (7)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda}f^2 + \tilde{\lambda}\tilde{s}, \quad (8)$$

которые уменьшаются при плавлении СМ за счет роста величины избыточного объема f^2 . Поскольку упругие постоянные не могут принимать отрицательных значений, при выполнении неравенства $f^2 > (\mu + \tilde{\mu}\tilde{s}) / \bar{\mu}$ следует полагать $\mu_{eff} = 0$, а в случае $f > (\lambda + \tilde{\lambda}\tilde{s}) / \bar{\lambda}$ необходимо принимать $\lambda_{eff} = 0$.

Для плоско-деформированного состояния СМ, в котором $\varepsilon_{22} = 0$, инварианты тензора деформации определяются следующим образом [25, 29]:

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ji}^e = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau}{\mu_{eff}} \right)^2 + (\varepsilon_{ii}^e)^2 \right], \quad (10)$$

где n , τ — нормальная и касательная компоненты напряжений, действующих на СМ со стороны трущихся поверхностей. Сдвиговое напряжение τ определяется из выражения (6), которое при $i \neq j$ или $\delta_{ij} = 0$ приводит к зависимости

$$\tau = 2\mu_{eff}\varepsilon_{ij}^e. \quad (11)$$

Стационарные состояния СМ определяются условием $\partial u / \partial f = 0$, приводящим к уравнению

$$\bar{\mu}\varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ji}^e + \alpha_\phi s^2 = \phi_0^* - \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 - \frac{1}{2}\phi_1 f^2 + \frac{1}{2}\phi_2 f^4 + \frac{n^2(\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (12)$$

которое удобно представить как функцию $\varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ji}^e(f, n, s, \tilde{s})$, либо $s(f, n, \varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ji}^e, \tilde{s})$. При анализе уравнения (12) упругую сдвиговую деформацию ε_{ij}^e будем определять согласно (9), (10), (11) через инварианты:

$$\varepsilon_{ij}^e = \frac{1}{2} \sqrt{2\varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ji}^e - (\varepsilon_{ii}^e)^2}. \quad (13)$$

Анализ приведенных выше уравнений показывает, что существуют критические значения деформации ε_{c0} и энтропии s_{c0} , при которых СМ плавится согласно механизму фазового перехода первого рода. Причем ε_{c0} является функцией энтропии s , а s_{c0} зависит от деформации ε_{ij}^e . Затвердевает СМ при других значениях деформации и энтропии s_c^0 , ε_c^0 . Поскольку предложенный для описания процесса плавления потенциал (1) является симметричным, то можно выделить следующие ситуации [27]: 1) в области значений $\varepsilon_{ij}^e < \varepsilon_c^0$ (либо $s < s_c^0$) СМ твердоподобный, что соответствует реализации единственного минимума энергии (1) при $f^2 = 0$; 2) в области значений $\varepsilon_{ij}^e > \varepsilon_{c0}$ (или $s > s_{c0}$) СМ имеет жидкоподобную структуру. Потенциал (1) в этом случае имеет два симметричных ненулевых минимума, разграниченных единственным максимумом; 3) в промежуточной области значений управляющих параметров $\varepsilon_c^0 < \varepsilon_{ij}^e < \varepsilon_{c0}$ ($s_c^0 < s < s_{c0}$) потенциал имеет два

симметричных минимума, которые отделены от нулевого минимума двумя симметричными максимумами, при этом состояние СМ зависит от начальных условий [8].

На фазовых диаграммах, построенных по уравнениям (12), (13), стационарные состояния СМ (при $\tilde{s} = 0$) разделены кривыми $\varepsilon_{c0}(s_{c0})$ и $\varepsilon_c^0(s_c^0)$ (рис. 1, а). Выше линии $\varepsilon_{c0}(s_{c0})$ СМ жидкоподобен и реализуется режим жидкостного трения (SF). Потенциал в этой области имеет вид, описанный выше как случай 2. Ниже кривой $\varepsilon_c^0(s_c^0)$ СМ твердоподобный, что соответствует виду внутренней энергии $u(f)$, описанному в случае 1. В области между рассматриваемыми кривыми состояние СМ зависит от начальных условий, потенциал здесь принимает вид, описанный случаем 3. Штриховыми линиями показаны области фазовой диаграммы при уменьшенном значении нормальных напряжений. Из рисунка видно, что с ростом нагрузки на трущиеся поверхности область сухого трения расширяется, а область гистерезиса, отделяющая указанную область от области жидкоподобного состояния, сужается. Внешняя нагрузка, описываемая в нашей модели нормальными напряжениями n , на трибологические наноразмерные системы часто оказывает критическое влияние. Например, в экспериментальной работе [7] показано, что рост нагрузки для одних типов СМ приводит к увеличению критической скорости плавления, а для других СМ эта скорость наоборот уменьшается. Также вариации давления приводят к изменению частоты фазовых переходов и т. д. Для выяснения влияния внешних напряжений на состояние СМ на рис. 1, б приведена фазовая диаграмма в координатах давление-энтропия. Из указанной диаграммы следует, что с ростом нагрузки на поверхности трения переход СМ между твердоподобным состоянием (область DF) и жидкоподобным (область SF) осуществляется, минуя область гистерезиса ($DF+SF$). Таким образом, при превышении критического значения внешней нагрузки, приложенной к поверхностям трения, фазовый переход первого рода не осуществляется, однако вместо него происходит непрерывное плавление СМ по механизму фазового превращения второго рода. Ранее авторами было показано, что рост нормальной компоненты напряжений приводит к затвердеванию СМ и увеличению значения полной силы трения, причем в зависимости от значения n может осуществляться фазовый переход как первого, так и второго рода [25]. При малых значениях внешнего давления такая модель описывает только фазовый переход первого рода.

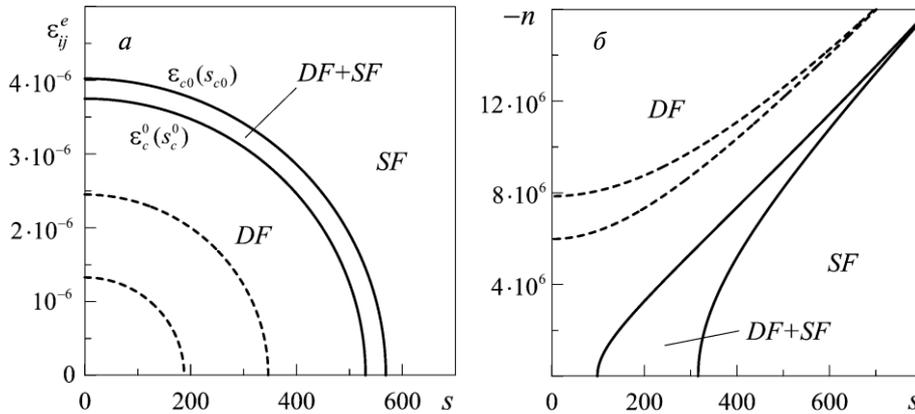


Рис. 1. Фазовые диаграммы с областями жидкостного (SF) и сухого (DF) трения при параметрах $\phi_0^* = 2$ Дж/м³, $\phi_1 = 8,5$ Дж/м³, $\phi_2 = 5,0$ Дж/м³, $\lambda = 5 \cdot 10^{11}$ Па, $\bar{\lambda} = 10^9$ Па, $\mu = 10^{12}$ Па, $\bar{\mu} = 2 \cdot 10^{11}$ Па, $\alpha = 0,95$ К²·м³/Дж, $\alpha_\phi = 2 \cdot 10^{-5}$ К²·м³/Дж, $\tilde{s} = 0$: а — сплошные линии соответствуют напряжению $n = -10^7$ Па, для штриховых $n = -3 \cdot 10^6$ Па; б — сплошные линии соответствуют деформации $\varepsilon_y^e = 0$, для штриховых $\varepsilon_y^e = 3 \cdot 10^{-6}$

Подобные фазовые диаграммы получают также при обобщении экспериментальных данных [7]. Одним из распространенных способов получения фазовых диаграмм является анализ временных зависимостей силы трения $F(t)$ при изменении температуры, скоростей сдвига, толщины СМ и т. п. Сила трения задается выражением [4, 8, 24, 25]:

$$F_{ij} = \left[\tau + k \cdot \operatorname{sgn}(V_{ij}) \left(\frac{|V_{ij}|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (14)$$

где первое слагаемое в скобках, определяемое выражением (11), задает упругую составляющую силы трения, а второе — вязкую. В последнем выражении введены площадь контакта сдвигаемых поверхностей A и феноменологические коэффициенты k, γ , позволяющие учесть тип СМ [24]. В выражении (14) фигурирует скорость относительного сдвига поверхностей трения V_{ij} , значение которой в стационарном случае $d\varepsilon_{ij}^e/dt = 0$ зависит от толщины СМ h и времени релаксации внутренних напряжений τ_e [8, 26]:

$$V_{ij} = \frac{h\varepsilon_{ij}^e}{\tau_e}. \quad (15)$$

С учетом последней формулы для положительных значений ε_{ij}^e выражение (14) принимает вид

$$F_{ij} = \left[\tau + k \left(\frac{\varepsilon_{ij}^e}{\tau_e} \right)^{\gamma+1} \right] A. \quad (16)$$

Зависимость (16) приведена на рис. 2, где, как и ранее, полагается $\tilde{s} = 0$. Здесь штрихпунктирный участок соответствует твердоподобному СМ, сплошные кривые отвечают жидкоподобному состоянию, а участки, показанные штриховыми линиями, отвечают неустойчивым стационарным решениям. На рис. 2, а видно, что при $s > s_{c0}$ происходит плавление СМ со скачкообразным уменьшением силы трения, а в случае $s < s_c^0$ СМ затвердевает и сила трения снова увеличивается. Для кривой 2 данные переходы не показаны, чтобы не загромождать рисунок. Когда СМ находится в твердоподобном состоянии (штрихпунктирный участок), сила трения от энтропии не зависит, поскольку при этом реализуется стационарное значение $f = 0$. Кривые 1–3 построены при последовательном увеличении величины давления на поверхности трения. Для кривых 1 и 2 наблюдается гистерезис, потому как реализуется фазовый переход первого рода, при котором модуль сдвига (7) изменяется скачкообразно, причем с ростом давления область гистерезиса сужается (как было показано ранее на рис. 1). При параметрах кривой 3 реализуется непрерывный фазовый переход второго рода, когда критическое значение энтропии s_{c0} , при котором СМ плавится, совпадает со значением, при котором она затвердевает.

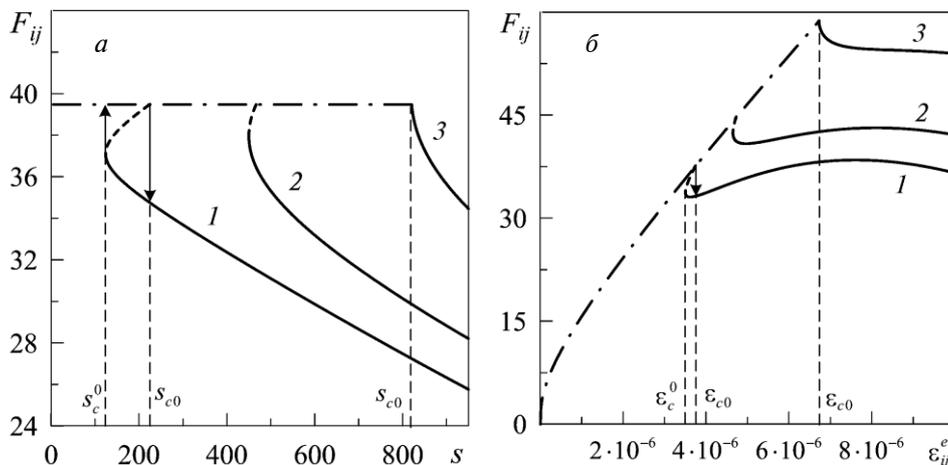


Рис. 2. Зависимости силы трения F_{ij} (мН) (14) от величины упругих деформаций ε_{ij}^e и энтропии s (Дж·К⁻¹·м⁻³) при параметрах рис. 1, а также $\tau_e = 10^{-8}$ с, $\gamma = -2/3$, $k = 7 \cdot 10^5$ Па·с^{1/3}, $A = 3 \cdot 10^{-9}$ м²: а — $\varepsilon_{ij}^e = 4 \cdot 10^{-6}$; б — $s = 300$ Дж·К⁻¹·м⁻³.

Кривые 1–3 на обоих рисунках отвечают значениям $n = -1, 1 \cdot 10^7$ Па, $-1, 4 \cdot 10^7$ Па, $-2 \cdot 10^7$ Па

Зависимости, приведенные на рис. 2, б, показывают, что при малых деформациях СМ твердоподобен и реализуется сухое трение (штрихпунктирная часть зависимости). Повышение ε_{ij}^e в режиме сухого трения приводит к росту силы трения (14). При значении $\varepsilon_{ij}^e > \varepsilon_{c0}$ СМ плавится и упругие сдвиговые напряжения (11) резко уменьшаются, что для кривых 1 и 2 приводит к скачкообразному снижению силы трения F_{ij} . С дальнейшим увеличением деформации значение F_{ij} сначала возрастает, а затем начинает уменьшаться за счет снижения упругой составляющей силы трения, хотя вязкая с ростом деформации продолжает расти. Затвердевает СМ при значении $\varepsilon_{ij}^e < \varepsilon_c^0$ (обратный переход для кривой 1 из-за масштаба стрелками не показан, для кривой 2 также не показан и прямой переход). Согласно кривой 3 при большом значении нормальных напряжений (давления на поверхности), как и для рис. 2, а, происходит фазовый переход второго рода, при котором сила трения изменяется непрерывно. Результаты, представленные на рис. 2, б, представляют разновидность диаграммы Страйбека для граничного режима, которая впервые была предложена в работе [30] при обобщении экспериментальных данных.

Система кинетических уравнений. Поскольку задан вид внутренней энергии (1), легко найти текущую температуру СМ:

$$\frac{\partial u}{\partial s} \equiv T = 2s(\alpha - \alpha_\phi f^2), \quad (17)$$

аналогичным образом определяется эффективная температура неравновесной подсистемы:

$$\frac{\partial u}{\partial \tilde{s}} \equiv \tilde{T} = t_0 - t_1 \tilde{s}. \quad (18)$$

Для дальнейшего исследования кинетических процессов запишем эволюционные уравнения для неравновесных параметров f и \tilde{s} в виде системы уравнений типа Ландау-Халатникова:

$$\tau_f \dot{f} = -\frac{\partial u}{\partial f}, \quad \tau_s \dot{\tilde{s}} = \frac{\partial u}{\partial \tilde{s}}, \quad (19)$$

где постоянные τ_f, τ_s обратны кинетическим коэффициентам. Согласно уравнениям (19) внутренняя энергия по координате f стремится к своему минимальному значению, а по координате \tilde{s} — к максимуму, что соответствует неравновесным процессам [27, 31].

Эволюционные уравнения (19) в явном виде принимают вид [27]:

$$\tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = -2\phi_0 f + \phi_1 f^3 - \phi_2 f^5 - \frac{2n^2 \bar{\lambda} + \bar{\mu} f}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (20)$$

$$\tau_s \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t} = t_0 - t_1 \tilde{s}, \quad (21)$$

где наличие последнего слагаемого в (20) обусловлено зависимостью инвариантов (9), (10) от величины f . В уравнении (21) слагаемое со знаком "+" описывает прирост неравновесной энтропии за счет внешних источников энергии (работа), а со знаком "-" — ее уход в равновесную подсистему.

Поскольку рассматривается неравновесная открытая система, для описания процессов теплообмена СМ с окружающей средой целесообразно ввести температуру трущихся поверхностей трения T_e . В случае неоднородного нагрева среды уравнение теплопроводности представляет обычное уравнение непрерывности [28]

$$T \frac{\partial s}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T, \quad (22)$$

где коэффициент теплопроводности κ полагается постоянным. Для упрощения задачи будем считать слой СМ однородным по плоскости ($\nabla_x^2 = \nabla_y^2 = 0$). Ввиду тонкости слоя СМ для нормальной составляющей ∇_z^2 с достаточной точностью можно использовать приближение [28]

$$\nabla_z^2 T \approx \frac{T_e - T}{h^2}, \quad (23)$$

где h — толщина СМ или расстояние между трущимися поверхностями (см. (15)). С учетом приближения (23) уравнение (22) запишется в более простом виде

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right), \quad (24)$$

где величина h^2 / κ играет роль времени релаксации, в течение которого происходит выравнивание температур по толщине слоя СМ за счет теплопроводности. Однако (24) еще не учитывает взаимодействие равновесной и неравновесной подсистем. Убыль неравновесной энтропии учитывается отрицательными слагаемыми в эволюционном уравнении (21), значит, эти же слагаемые должны учитывать прирост равновесной энтропии. С учетом этого обстоятельства получим окончательное уравнение для равновесной энтропии:

$$\tau_s \frac{\partial s}{\partial t} = t_1 \tilde{s} + \tau_s \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right), \quad (25)$$

где температура СМ T (17) в стационарном состоянии $\partial s / \partial t = 0$ определяется не только температурой поверхностей трения T_e , играющей роль термостата (окружающей среды), как в (24), но также и значением неравновесной энтропии \tilde{s} .

В работах [24, 25] получено кинетическое уравнение для деформации ε_{ij}^e в виде

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{ij}^e = -\varepsilon_{ij}^e + \frac{V_{ij} \tau_\varepsilon}{h}, \quad (26)$$

где τ_ε — максвелловское время релаксации внутренних напряжений, а V_{ij} — ранее введенная в (14) относительная скорость сдвига трущихся поверхностей. Поскольку далее при расчетах выбирается малое значение времени релаксации $\tau_\varepsilon = 10^{-8}$ с, будем действовать в рамках приближения $\tau_\varepsilon \ll \tau_f, \tau_s$ [32, 33], в котором можно положить $\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{ij}^e \approx 0$. При этом последнее уравнение приводит к зависимости (ср. с (15)):

$$\varepsilon_{ij}^e = \frac{V_{ij} \tau_\varepsilon}{h}. \quad (27)$$

Для исследования кинетики системы необходимо совместно численно решать систему кинетических уравнений (20), (21), (25), определяя инварианты согласно (9), (10), сдвиговые напряжения τ из (11), упругие постоянные из (7), (8), текущую температуру T СМ согласно (17), а деформации согласно соотношению (27).

Кинетика трибологической системы. Динамические характеристики любой трибологической системы определяются ее свойствами в целом. В частности, в области рассмотренного ранее гистерезиса в процессе трения возможна реализация прерывистого (*stick-slip*) режима движения [7, 13]. Типичная схема механического аналога трибологической системы представлена на рис. 3. Здесь пружина с жесткостью K связана с блоком массы M , к которому приложена дополнительная нормальная нагрузка L . Блок расположен на гладкой поверхности, от которой отделен слоем СМ толщиной h . Свободный конец пружины приводится в движение с фиксированной скоростью V_0 . При движении блока возникает сила трения F (14), оказывающая сопротивление его передвижению. В общем случае скорость блока V и пружины V_0 не совпадают из-за осциллирующего характера силы F , что приводит к прерывистому движению блока. Данный режим напоминает сухое

трение без смазки [12]. Нагрузка L связана с рассматриваемой в работе нормальной компонентой напряжений n как $n = -L/A$, где A — площадь контакта поверхностей, входящая в выражение (14).

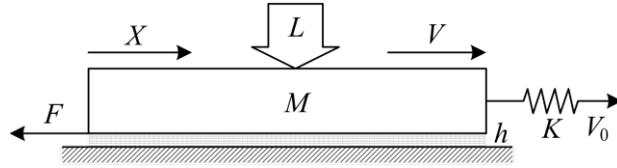


Рис. 3. Механический аналог простейшей трибологической системы

Обозначим текущую координату верхнего блока X , тогда соответствующее уравнение движения имеет вид [7, 34]

$$M\ddot{X} = K\Delta X - F. \quad (28)$$

Здесь ΔX — величина растяжения пружины, которую можно определить как

$$\Delta X = \int_0^t V_0 dt' - X, \quad (29)$$

где $t = t'$ — время движения свободного конца пружины.

Для исследования кинетических режимов граничного трения, возникающих в системе, показанной на рис. 3, будем действовать в рамках введенного ранее адиабатического приближения $\tau_e \ll \tau_f, \tau_s$. При этом достаточно решать систему кинетических уравнений (20), (21), (25), (28), определяя текущую деформацию согласно соотношению (27). Результат решения указанных уравнений представлен на рис. 4, где приведены зависимости от времени силы трения F (14), скорости сдвига верхнего трущегося блока $V = \dot{X}$, координаты блока X , натяжения пружины ΔX , а также упругих напряжений τ , возникающих в СМ. В начале движения все представленные на рисунке параметры монотонно возрастают, потому как для плавления СМ необходимо, чтобы либо температура СМ T , либо скорость сдвига V превышала критическое значение. Поскольку приведенные зависимости получены для значения температуры поверхностей трения T_e , обеспечивающей температуру СМ T меньше критической величины, в состоянии покоя при $t = 0$ СМ находится в твердоподобном состоянии и характеризуется ненулевым значением эффективного модуля сдвига. В начальный момент времени свободный конец пружины начинает перемещаться со скоростью $V_0 \neq 0$, что приводит к ее натяжению, росту скорости сдвига верхней поверхности V , и согласно (14) увеличению силы трения F . В результате этого наступает момент времени, когда скорость V превышает критическое значение и реализуется плавление СМ согласно механизма “плавления сдвигом” [7]. После плавления напряжения быстро релаксируют к нулевому значению, что обеспечивает нулевое значение упругой составляющей силы трения F , однако ввиду резкого увеличения скорости сдвига V значительно увеличивается вязкая составляющая F , что не приводит к резкому уменьшению силы трения. Далее за счет уменьшения натяжения пружины ΔX скорость сдвига V вновь уменьшается, а с ней уменьшается и вязкая компонента силы трения. Со временем наступает ситуация, когда скорость V становится меньше критической величины, и становится не в состоянии поддерживать СМ в расплавленном состоянии. После этого момента СМ затвердевает, в нем появляются упругие напряжения и соответственно упругая компонента силы трения F . Ввиду этого верхний блок замедляется (резкое уменьшение скорости V на рисунке после ее резкого увеличения и последующей релаксации). Описанный процесс повторяется периодически во времени, обеспечивая прерывистый режим движения (stick-slip) с пилообразной временной зависимостью силы трения от времени. Координата блока X при этом монотонно увеличивается, поскольку он смещается в одном направлении. Стоит отметить, что в рассматриваемом случае согласно зависимости $\tau(t)$ в расплавленном состоянии СМ исчезают упругие напряжения, поскольку эффективный модуль сдвига μ_{eff} (7) принимает нулевое значение. Однако это не является необ-

ходимым условием для обеспечения такого режима. Подобное поведение было показано ранее в рамках более простой равновесной термодинамической модели [8, 9, 34].

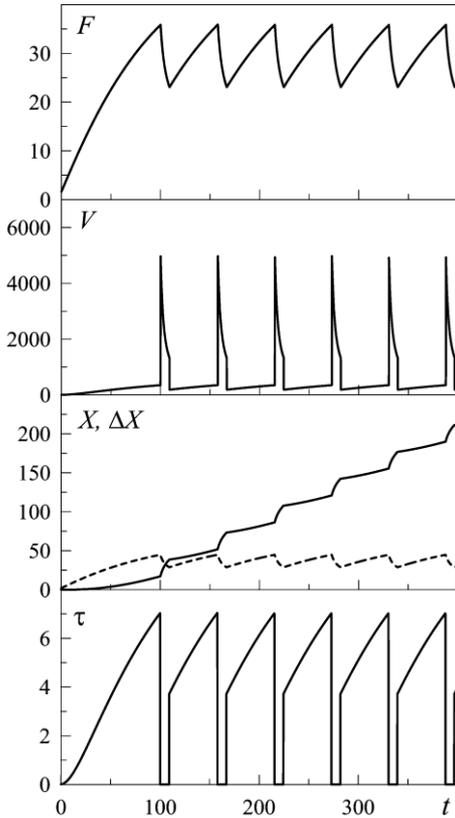


Рис. 4. Зависимости полной силы трения F (мН) (14), скорости сдвига верхней трущейся поверхности V (нм/с), ее координаты X (мкм), длины растяжения движущей пружины ΔX (мкм) и упругих сдвиговых напряжений τ (МПа) от времени t (с) при параметрах рис. 1, 2 и $t_0^* = 600$ К, $t_1 = 200$ К²·м³/Дж, $\tilde{\lambda} = 2 \cdot 10^9$ К, $\tilde{\mu} = 5 \cdot 10^9$ К, $\tau_f = 0,1$ Дж·с/м³,

$$\tau_s = 0,01 \text{ К}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^3 / \text{Дж}, \kappa = 10^{-10} \text{ Вт} / (\text{К} \cdot \text{м}), h = 10^{-9} \text{ м}, K = 800 \text{ Н/м}, M = 0,1 \text{ кг}$$

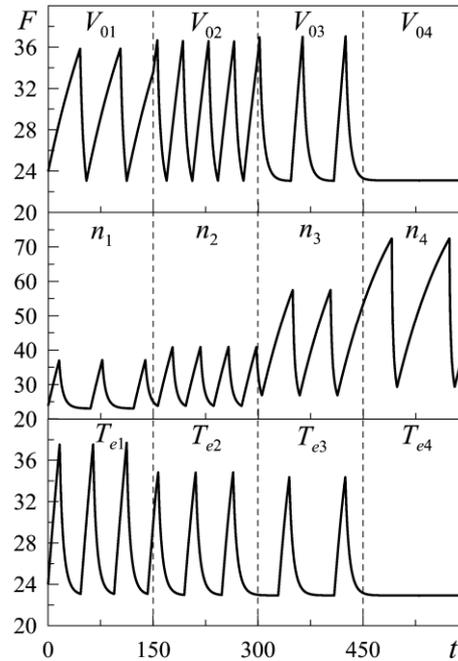


Рис. 5. Зависимости полной силы трения F (мН) (14) от времени t (с) при параметрах рис. 4. Верхняя часть: $T_e = 280$ К, $n = -0,8 \cdot 10^7$ Па, $V_{01} = 600$ нм/с, $V_{02} = 1000$ нм/с, $V_{03} = 1320$ нм/с, $V_{04} = 1330$ нм/с; средняя часть: $T_e = 280$ К, $V_0 = 1320$ нм/с, $n_1 = -0,8 \cdot 10^7$ Па, $n_2 = -10^7$ Па, $n_3 = -1,8 \cdot 10^7$ Па, $n_4 = -2,5 \cdot 10^7$ Па; нижняя часть: $V_0 = 1300$ нм/с, $n = -0,8 \cdot 10^7$ Па, $T_{e1} = 200$ К, $T_{e2} = 600$ К, $T_{e3} = 715$ К, $T_{e4} = 720$ К

На режим трения сильное влияние оказывают управляющие параметры (температура поверхностей T_e , скорость сдвига V_0 и внешнее давление n). Поскольку указанный режим трения является одной из основных причин разрушения трущихся деталей в устройствах микроэлектроники, проведем дополнительное исследование указанных факторов на особенности прерывистого режима. На верхней части рис. 5 показана зависимость силы трения (14) от времени при увеличивающейся скорости сдвига свободного конца пружины V_0 при остальных фиксированных параметрах. Видно, что рост скорости вначале приводит к увеличению частоты фазовых переходов, а затем указанная частота снижается за счет появления на зависимости $F(t)$ кинетических участков. Также отметим, что существует критическое значение скорости, при котором СМ все время находится в жидкоподобном состоянии и обеспечивает кинетический режим скольжения с минимальным постоянным значением силы трения ($V_0 = V_{04}$). Такое поведение неоднократно наблюдалось в экспериментах [7, 35]. С ростом нормальной компоненты нагрузки, приложенной к верхней трущейся поверхности (средняя часть рис. 5) происходит уменьшение длины кинетического участка $F = \text{const}$ и возрастание амплитуды силы трения. Согласно рисунку, уровень нагрузки влияет на систему необычным образом, поскольку частота фазовых переходов сначала увеличивается, а затем снова уменьшается. Подобные особенности демонстрировала трибологическая система, детально исследованная в экспериментальной работе [7]. Отметим, что такое влияние нагрузки на поведение системы в

целом связано еще и с тем, что при превышении нормальными внешними напряжениями критического значения изменяется тип фазового перехода (см. рис. 1 и описание к нему). И наконец, с повышением температуры (нижняя часть рассматриваемого рисунка) система проявляет тенденции к плавлению, что выражается в уменьшении амплитуды $F(t)$, а также в удлинении кинетических участков $F = \text{const}$. При превышении температурой критической величины ($T_e = T_{e4}$) СМ плавится полностью, что приводит к установлению кинетического режима скольжения с постоянной скоростью V , что, в свою очередь, обеспечивает значение $F = \text{const}$.

Отметим, что согласно экспериментальной работе [7] появление длинных кинетических участков $F = \text{const}$ на зависимости $F(t)$ происходит тогда, когда значение скорости сдвига V близко к критической величине, при которой происходит плавление. В рамках нашего представления эта особенность также проявляется, поскольку на верхней части рис. 5 скорости V_{03} и V_{04} близки по значению. Нижняя часть рис. 5 показывает такую же особенность для температуры поверхностей трения, поскольку температуры T_{e3} и T_{e4} , как и скорости на верхней части рисунка, имеют близкие значения.

Заключение. В статье предложена модель граничного трения, базирующаяся на принципах неравновесной термодинамики. На ее основе описан ряд эффектов, наблюдаемых при трении атомарно-гладких твердых поверхностей, разделенных граничным слоем СМ. Рассмотрены стационарные состояния смазочных материалов в зависимости от давления, скорости сдвига и температуры. Также изучен динамический режим в рамках механического аналога трибологической системы при сдвиге верхней трущейся поверхности в одну сторону. Получены зависимости силы трения от скорости сдвига и температуры и показано, что смазка плавится при превышении этими величинами критических значений. При высокой температуре поверхностей трения сдвиговое плавление наступает при меньшем значении скорости сдвига, а при еще большем увеличении температуры смазка плавится даже при нулевой скорости сдвига. Изучение влияния нормальной компоненты давления на поверхности трения показывает, что фазовый переход первого рода осуществляется при низких нагрузках на трущиеся поверхности, а когда нагрузка превышает критическое значение, он становится непрерывным фазовым переходом второго рода. Показано, что в широком диапазоне параметров реализуется прерывистый режим трения. Полученные результаты качественно совпадают с известными экспериментальными данными, однако, поскольку модель является количественной и предполагает возможность модификации, при необходимости можно добиться и количественных совпадений для конкретного эксперимента.

Работа поддержана проектом "Моделирование трения металлических наночастиц и граничных пленок жидкостей, взаимодействующих с атомарно-гладкими поверхностями" Министерства образования и науки, молодежи и спорта Украины и частично выполнена в период пребывания Я. А. Ляшенко и А. В. Хоменко в Исследовательском центре Юлиха (Forschungszentrum Julich) (Германия) по приглашению Б. Н. Й. Перссона (B. N. J. Persson).

Обозначения

u — плотность внутренней энергии; f^2 — избыточный объем (параметр беспорядка); ε_{ij}^e — тензор упругих деформаций; s — равновесная энтропия; \tilde{s} — неравновесная энтропия; $u_0, t_0, t_1, \phi_0, \phi_1, \phi_2$ — параметры разложения внутренней энергии; ε_{ii}^e — первый инвариант тензора деформаций; $\varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$ — второй инвариант тензора деформаций; $u_0^*, \lambda, \mu, \alpha, \phi_0^*, \bar{\lambda}, \bar{\mu}, \alpha_\phi, t_0^*, \tilde{\lambda}, \tilde{\mu}$ — параметры разложения внутренней энергии; σ_{ij}^e — тензор упругих напряжений; δ_{ij} — дельта-символ Кронекера; μ_{eff}, λ_{eff} — эффективные упругие постоянные (константы Ламе); ε_{22} — диагональная компонента тензора деформаций; n — нормальная компонента напряжений, приложенных к поверхностям трения; τ — тангенциальная компонента напряжений; $\varepsilon_{c0}(s_{c0})$ — критическое значение деформации (энтропии), при которой СМ плавится; $\varepsilon_c^0(s_c^0)$ — критическое значение деформации (энтропии), при которой СМ затвердевает; F — сила трения; t — время; F_{ij} — тензор сил трения; k, γ — феноменологические коэффициенты, задающие зависимость эффективной

вязкости η_{eff} от градиента скорости; V_{ij} — тензор относительных скоростей сдвига поверхностей трения; h — толщина СМ; A — площадь контакта поверхностей трения; τ_e — максвелловское время релаксации напряжений; T — температура СМ; \tilde{T} — неравновесная температура СМ; τ_f, τ_s — постоянные, обратные кинетическим коэффициентам в уравнениях релаксации избыточного объема и равновесной энтропии; T_e — температура поверхностей трения; κ — коэффициент теплопроводности; x, y, z — декартовы координаты; K — коэффициент жесткости пружины; M — масса верхнего трущегося блока; L — внешняя нагрузка, приложенная к поверхностям трения; X — координата верхнего трущегося блока; ΔX — натяжение пружины; V_0 — скорость движения свободного конца пружины; t' — время; $V_{01}, V_{02}, V_{03}, V_{04}$ — фиксированные значения скоростей; n_1, n_2, n_3, n_4 — фиксированные значения нормальных напряжений; $T_{e1}, T_{e2}, T_{e3}, T_{e4}$ — фиксированные значения температур поверхностей трения.

Литература

1. **Nanotribology and Nanomechanics** / Ed. by B. Bhushan. — Berlin: Springer-Verlag. — 2005
2. **Persson B. N. J.** Sliding Friction. Physical Principles and Applications. — Berlin: Springer-Verlag. — 2000
3. **Бойко В. И., Валяев А. Н., Погребняк А. Д.** Модификация металлических материалов импульсными мощными пучками частиц // УФН. — 1999 (**169**), 1243—1271
4. **Metlov L. S., Khomenko A. V., and Lyashenko I. A.** Multidimensional Thermodynamic Potential for Descriptions of Ultrathin Lubricant Film Melting between Two Atomically Smooth Surfaces // Cond. Matt. Phys. — 2011 (**14**), 13001:1—11
5. **Popov V. L.** Contact Mechanics and Friction: Physical Principles and Applications. — Berlin: Springer-Verlag. — 2010
6. Погребняк А. Д., Братушка С. Н., Ильяшенко М. В., Махмудов Н. А., Колисниченко О. В., Тюрин Ю. Н., Углов В. В., Пшик А. В., Каверин М. В. Триботехнические и физико-механические свойства защитных покрытий из Ni—Cr—B—Si—Fe/WC—Co—Cr до и после оплавления плазменной струей // Трение и износ. — 2011 (**32**), 122—130
7. **Yoshizawa H. and Israelachvili J.** Fundamental Mechanisms of Interfacial Friction. 2. Stick-Slip Friction of Spherical and Chain Molecules // J. Phys. Chem. — 1993 (**97**), 11300—11313
8. **Ляшенко Я. А.** Трибологическая система в режиме граничного трения под периодическим внешним воздействием // Журнал технической физики. — 2011 (**81**), 125—132
9. **Ляшенко Я. А.** Фазовый переход первого рода между жидкоподобной и твердоподобной структурами граничной смазки // Журнал технической физики. — 2012 (**82**), 19—28
10. **Lee R.-T., Yang C.-R., and Chiou Y.-C.** A Procedure for Evaluating the Positioning Accuracy of Reciprocating Friction Drive Systems // Tribol. Int. — 1996 (**29**), 395—404
11. **Yang C.-R., Lee R.-T., and Chiou Y.-C.** Study on Dynamic Friction Characteristics in Reciprocating Friction Drive System // Tribol. Int. — 1997 (**30**), 719—731
12. **Ляшенко Я. А.** Трибологические свойства режимов сухого, жидкостного и граничного трения // Журнал технической физики. — 2011 (**81**), 115—121
13. **Filippov A. E., Klafter J., and Urbakh M.** Friction Through Dynamical Formation and Rupture of Molecular Bonds // Phys. Rev. Lett. — 2004 (**92**), 135503 (4)
14. **Brener E. A. and Marchenko V. I.** Frictional Shear Cracks // JETP Lett. — 2002 (**76**), 211—214
15. **Smith E. D., Robbins M. O., and Cieplak M.** Friction on Adsorbed Monolayers // Phys. Rev. B. — 1996 (**54**), 8252—8260
16. **Хоменко А. В., Ляшенко Я. А.** Плавление ультратонкой пленки смазки за счет диссипативного разогрева поверхностей трения // Журнал технической физики. — 2007 (**77**), 137—140
17. **Хоменко А. В., Ляшенко Я. А.** Периодический прерывистый режим граничного трения // Журнал технической физики. — 2010 (**80**), 27—33
18. **Khomenko A. V., Lyashenko I. A., and Borisyyuk V. N.** Multifractal Analysis of Stress Time Series During Ultrathin Lubricant Film Melting // Fluct. Noise Lett. — 2010 (**9**), 19—35

19. Хоменко А. В., Ляшенко Я. А. Стохастическая теория прерывистого режима плавления ультратонкой пленки смазки // Журнал технической физики. — 2005 (75), 17—25
20. Хоменко А. В., Ляшенко Я. А. Гистерезисные явления при плавлении ультратонкой пленки смазки // Физика твердого тела. — 2007 (49), 886—890
21. Demirel A. L. and Granick S. Transition From Static to Kinetic Friction in a Model Lubricating System // J. Chem. Phys. — 1998 (109), 6889—6897
22. Reiter G., Demirel A. L., Peanasky J., Cai L. L., and Granick S. Stick to Slip Transition and Adhesion of Lubricated Surfaces in Moving Contact // J. Chem. Phys. — 1994 (101), 2606—2615
23. Israelachvili J. Adhesion Forces Between Surfaces in Liquids and Condensable Vapours // Surf. Sci. Rep. — 1992 (14), 109—159
24. Lyashenko I. A., Khomenko A. V., and Metlov L. S. Thermodynamics and Kinetics of Boundary Friction // Tribol. Int. — 2011 (44), 476—482
25. Ляшенко Я. А., Хоменко А. В., Метлов Л. С. Нелинейная термодинамическая модель граничного трения // Трение и износ. — 2011 (32), 157—170
26. Ляшенко Я. А., Хоменко А. В., Метлов Л. С. Феноменологическая теория плавления тонкой пленки смазки между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями // Журнал технической физики. — 2010 (80), 120—126
27. Ляшенко Я. А., Метлов Л. С., Хоменко А. В., Чепульский С. Н. Неравновесные стационарные режимы граничного трения // Журнал нано- и электронной физики. — 2011 (3), 59—69
28. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория упругости. — Москва: URSS. — 2007
29. Качанов Л. М. Основы теории пластичности. — Москва: Наука. — 1969
30. Luengo G., Israelachvili J., and Granick S. Generalized Effects in Confined Fluids: New Friction Map for Boundary Lubrication // Wear. — 1996 (200), 328—335
31. Metlov L. S. Formation of Internal Structure of Solids Under Severe Load // Phys. Rev. E. — 2010 (81), 051121 (9)
32. Olemskoi A. I. Axiomatic Theory of Self-Organizing System // Physica A. — 2002 (310), 223—233
33. Olemskoi A. I., Khomenko A. V., and Kharchenko D. O. Self-organized Criticality within Fractional Lorenz Scheme // Physica A. — 2003 (323), 263—293
34. Попов В. Л. Термодинамика и кинетика плавления сдвигом тонкого слоя смазки, заключенного между твердыми телами // Журнал технической физики. — 2001 (71), 100—110
35. Gee M. L., McGuiggan P. M., and Israelachvili J. N. Liquid to Solidlike Transitions of Molecularly Thin Films Under Shear // J. Chem. Phys. — 1990 (93), 1895—1906

Поступила в редакцию 19.01.12.

Lyashenko I. A., Metlov L. S., Khomenko A. V., and Chepulskyi S. N. **Non-Equilibrium Kinetics of Phase Transitions in the Boundary Friction Mode.**

Non-equilibrium evolution thermodynamic model describing the processes in the mode of boundary friction is proposed. For description of lubricating layer state the excess volume parameter is introduced whose value is minimal at solid-like structure of lubricating layer and increases with melting. The source of system entropy growth is taken into account related to external energy gain at deformation of lubricating layer due to rubbing surfaces shear. It is shown that stick-slip mode of motion is realized in a wide range of parameters which is resulted from periodic phase transitions of the first-order between structural states of lubricating layer. The effect of shear velocity, normal component of load on rubbing surfaces, and their temperature is studied on the character of stick-slip friction. Critical value of external load exists at which first-order phase transition does not take place, instead of it the continuous second-order transition occurs.

Keywords: lubricant material, friction force, shear strain and stress, entropy, internal energy, phase transition, stick-slip regime.