08

Прерывистый режим плавления граничной смазки между двумя жесткими поверхностями с наноразмерными неровностями

© Я.А. Ляшенко,[1] И.В. Винниченко[2]

[1] Сумский государственный университет,
40007 Сумы, Украина
[2] ООО „NetCracker“,
40011 Сумы, Украина
e-mail: nabla04@ukr.net

(Поступило в Редакцию 27 сентября 2012 г.)

В рамках модели фазовых переходов первого рода на примере простого механического аналога трибологической системы, обладающей упругостью, изучаются процессы трения двух неровных поверхностей, работающих в граничном режиме при наличии смазочного слоя между ними. Рассмотрен прерывистый (stick-slip) режим движения, возникающий за счет периодических фазовых переходов между кинетическими режимами трения. Показано, что при наличии неровностей поверхностей в процессе движения в плоскости трения реализуется изменяющаяся со временем доменная структура, характеризуемая пространственным распределением значений параметра порядка.

Введение

Изучение процессов граничного трения привлекает внимание исследователей не первое десятилетие. Более века назад, в далеком 1902 г. немецкий ученый Рихард Герман Штрибек экспериментально получил зависимость коэффициента трения в подшипнике от скорости вращения при наличии смазки. Впоследствии эта зависимость получила название диаграммы Герси–Штрибека. При малой толщине смазки в начале движения подшипника на диаграмме реализуется переходной режим граничного трения. Граничный режим, согласно диаграмме Герси–Штрибека, характеризуется большим коэффициентом трения и, как следствие, повышенной диссипацией механической энергии, приводящей к нагреву трущихся деталей, который может привести к их разрушению. В связи с этим исследование режима граничного трения имеет высокое прикладное значение. С появлением современного инструментария стало возможным прямое наблюдение за сложнейшими процессами, происходящими в области контакта [1,2]. Причем современные эксперименты [3–6] подтверждают и уточняют многие интуитивные выводы, сделанные как советскими (Ахматов, Епифанов, Дерягин и др.), так и зарубежными (Гарди, Бир, Боуден и др.) учеными прошлого столетия.

В режиме граничного трения часто нарушается известный закон Амонтона. Например, в экспериментах Гарди по трению двух плоских поверхностей, разделенных граничным слоем ароматических соединений [7], коэффициент статического трения с ростом нагрузки уменьшается. Гарди поясняет это тем, что малые давления соответствуют мультимолекулярному смазочному слою, не обладающему текучестью, свойственной объемным смазкам. Таким образом, существуют предельные внутренние напряжения, при превышении которых начинается течение. Гарди также приходит к выводу, что с повышением давления слой смазки становится тоньше, что и приводит к изменению коэффициента трения. Таким образом, Гарди вводит зависимость коэффициента трения от толщины смазки. В предлагаемой работе как раз рассматривается ситуация, когда толщина смазочного слоя оказывает критическое влияние на режим трения. В своих работах Гарди пишет: „состояние смазки нельзя назвать ни жидким, ни твердым“. В современной литературе вводятся понятия жидкоподобного и твердоподобного состояний, отличающихся от равновесных термодинамических фаз, поскольку микрорельеф трущихся поверхностей оказывает существенное влияние на смазку, нарушая симметрию состояния [8,9].

Несмотря на то что изучение граничного режима имеет высокое прикладное и фундаментальное значение, до сих пор не существует единой теории граничного трения. Ввиду сложности процессов, протекающих при трении в зоне контакта, зачастую пользуются феноменологическими моделями [8,10–13]. Также для описания результатов экспериментов активно применяются методы молекулярной динамики [14–16]. В частности, в работах [17,18] предложена синергетическая модель, в которой плавление смазочного слоя происходит за счет механизмов термодинамического и сдвигового плавления. В работах Попова [8,10] разработана термодинамическая теория граничного трения, основанная на теории фазовых переходов Ландау второго рода [19], где в качестве параметра порядка выбирается модуль сдвига смазочного материала, принимающий нулевое значение в жидкоподобной фазе. Однако в режиме граничного трения часто наблюдаются скачкообразные фазовые превращения первого рода [9,12,20], приводящие к установлению прерывистого режима движения [9,20,21]. В связи с этим в [22,23] проведено обобщение теории [8,10] на случай реализации фазового перехода первого рода. В работах [22,23] исследуется специфическая ситуация трения атомарно-гладких поверхностей, которая, однако,

не является исключением и широко изучается экспериментально [5,6,9,20]. Предлагаемая работа является продолжением [22,23] и предпринята с целью теоретического изучения особенностей режима граничной смазки при взаимном трении поверхностей, обладающих наноразмерными неровностями. Поскольку в технических приложениях поверхности трения практически всегда обладают неровностями и неоднородностями, предлагаемый подход позволяет расширить результаты предыдущих работ на более широкий класс реальных трибологических систем.

1. Свободная энергия и фазовая диаграмма

В однородном случае выражение для плотности свободной энергии смазочного слоя между двумя твердыми поверхностями может быть представлено в виде [8,10,22,23]

$$f = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4, \qquad (1)$$

где T — температура смазки, T_c — критическая температура, ε_{el} — сдвиговая компонента упругой деформации, α, a, b, c — положительные постоянные. Параметр порядка φ представляет амплитуду периодической части микроскопической функции плотности среды [8,10]. Таким образом, жидкоподобная фаза смазки характеризуется стационарным значением $\varphi_0 = 0$, тогда как в твердоподобной фазе устанавливается ненулевое значение $\varphi_0 > 0$. Разложение (1) в отличие от работ [8,10] соответствует модели фазового перехода первого рода [19,22–24].

Поскольку параметр φ представляет собой модуляцию плотности, далее будем рассматривать диапазон $\varphi \geq 0$. Анализируя выражение (1), можно выделить критические температуры плавления T_{c0} и затвердевания T_c^0 смазки, причем $T_{c0} > T_c^0$ на постоянную величину, зависящую только от констант разложения [22,23]:

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

$$T_c^0 = T_c - \frac{a}{2\alpha}\varepsilon_{el}^2. \qquad (3)$$

В диапазоне температур $T_c^0 < T < T_{c0}$ на зависимости $\varphi_0(T, \varepsilon_{el})$ реализуется область гистерезиса, характерная для фазовых переходов первого рода [22,23]. Отметим, что при плавлении параметр порядка скачкообразно изменяется от стационарного значения $\varphi_0 = 0.5bc^{-1}$ до нуля, в то время как при затвердевании стационарное значение φ растет от нуля до величины $\varphi_0 = bc^{-1}$ [22,23].

При трении поверхностей в смазочном слое появляются упругие напряжения σ_{el}, определяющиеся как производная от свободной энергии f (1) по деформации ε_{el}:

$$\sigma_{el} = \mu\varepsilon_{el}, \qquad (4)$$

$$\mu = a\varphi^2, \qquad (5)$$

где модуль сдвига смазки μ сводится к квадрату параметра порядка с точностью до постоянного множителя a [8,10,22,23]. Сила трения, которая оказывает сопротивление движению поверхностей, определяется согласно формуле [12,22,23,25]:

$$F = \left[\sigma_{el} + k\,\mathrm{sgn}(V)\left(\frac{|V|}{h}\right)^{\gamma+1}\right]A, \qquad (6)$$

где A — площадь контакта трущихся поверхностей, h — толщина смазочного слоя, а феноменологические параметры k, γ задают тип смазочного материала [21,26]. В частности, значение $\gamma < 0$ отвечает неньютоновской псевдопластической смазке. Второе слагаемое в скобках в выражении (6) представляет вязкие напряжения, существующие только при движении поверхностей с относительной скоростью $V \neq 0$. В формуле (6) сила трения пропорциональна площади контакта A и не зависит от нагрузки на поверхности. Это связано с тем, что рассматриваются специфические условия трения двух наноразмерных поверхностей, разделенных слоем простой неполярной смазки. Причем между поверхностями при движении поддерживается фиксированное расстояние. В этом случае площадь реального контакта через смазку близка к площади поверхностей вне зависимости от приложенного давления, что позволяет использовать формулу (6). При этом такое понятие, как коэффициент трения, теряет смысл [27].

В работах [12,22,23,28] показано, что при движении трущихся поверхностей с относительной скоростью V в смазочном слое возникают стационарные упругие деформации

$$\varepsilon_{el}^0 = \frac{V\tau_\varepsilon}{h}, \qquad (7)$$

где τ_ε — максвелловское время релаксации внутренних напряжений [8]. При значении $\tau_\varepsilon \ll 1$ выражение (7) с достаточной точностью может быть использовано для определения текущего значения деформации ε_{el}. С учетом (7) из выражений для температур (2) и (3) легко получить аналогичные выражения для определения критических скоростей [22,23]:

$$V_{c0} = \frac{h}{\tau_\varepsilon}\sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{4ac}}, \qquad (8)$$

$$V_c^0 = \frac{h}{\tau_\varepsilon}\sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}. \qquad (9)$$

На рис. 1 показана фазовая диаграмма состояний смазки. Она представляет зависимость скоростей V_{c0} и V_c^0 от температуры T. Выше кривой V_{c0} смазка жидкоподобна (потенциал $f(\varphi)$ обладает единственным минимумом при $\varphi = 0$), и реализуется режим жидкостного трения SF. В области $V < V_c^0$ смазка обладает твердоподобной структурой, что соответствует единственному минимуму потенциала при $\varphi > 0$. Между кривыми на рисунке

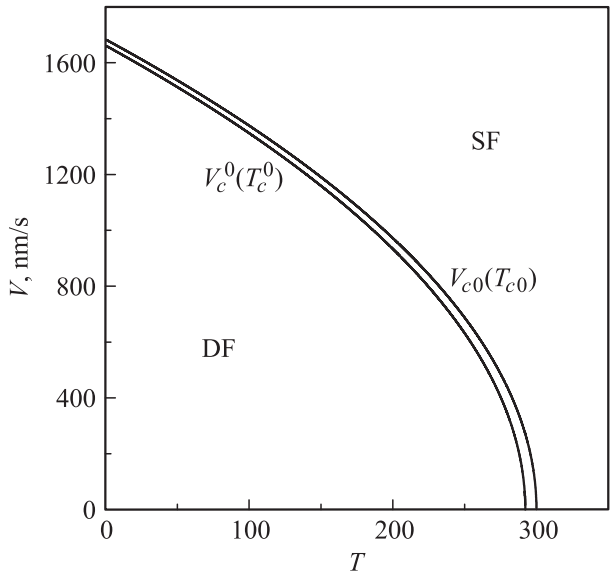

Рис. 1. Фазовая диаграмма с областями жидкоподобной (SF) и твердоподобной (DF) смазки при параметрах $\alpha = 0.95\,\mathrm{J\cdot K^{-1}/m^3}$, $T_c = 290\,\mathrm{K}$, $a = 2\cdot 10^{12}\,\mathrm{Pa}$, $b = 230\,\mathrm{J/m^3}$, $c = 900\,\mathrm{J/m^3}$, $h = 10^{-9}\,\mathrm{m}$, $\tau_\varepsilon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

потенциал $f(\varphi)$ в положительной области φ обладает нулевым и ненулевым минимумами, которые разделены максимумом. Таким образом, в этой промежуточной области состояние смазочного материала зависит от начальных условий. Рис. 1 можно также интерпретировать как зависимости критических температур T_{c0} (2) и T_c^0 (3) от скорости сдвига V.

2. Кинетика плавления смазки

На рис. 2 представлена схема типичной трибологической системы [8,9,20], поведение которой в рамках предлагаемой модели исследовалось нами ранее [23]. Основное отличие предлагаемой работы от предыдущих в том, что ранее исследовалось поведение атомарно-гладких трущихся поверхностей, в то время как данная работа направлена на изучение процессов граничного трения поверхностей, обладающих рельефом. Система, приведенная на рис. 2, состоит из пружины с жесткостью K, верхнего блока массой M, который скользит по нижней поверхности, отделенной от него слоем смазки толщиной h, которая далее в каждой точке поверхностей имеет свое конкретное значение, изменяющееся при движении. Свободный конец пружины приводится в движение с фиксированной скоростью V_0. При скольжении блока по поверхности между ними возникает сила трения F, определяющаяся согласно формуле (6).

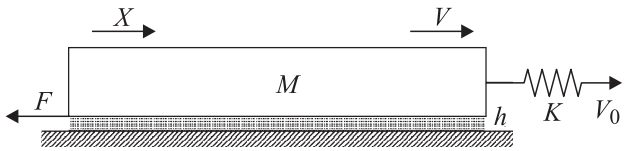

Рис. 2. Схема трибологической системы.

Запишем уравнение движения верхнего блока с координатой X в виде [8,9,23]

$$M\ddot{X} = K(V_0 t - X) - F, \tag{10}$$

где выражение в скобках представляет растяжение пружины ΔX, а t — время движения ее свободного конца. В дополнение к (10) необходимо записать кинетическое уравнение типа Ландау–Халатникова [23,29]

$$\dot{\varphi} = -\delta\frac{\partial f}{\partial \varphi}, \tag{11}$$

которое в явном виде приобретает форму

$$\dot{\varphi} = -\delta\left(2\alpha(T - T_c)\varphi + a\varphi\varepsilon_{el}^2 - b\varphi^2 + c\varphi^3\right) + \xi(t). \tag{12}$$

В (12) введен кинетический коэффициент δ, а также дополнительное стохастическое слагаемое $\xi(t)$, представляющее малые аддитивные флуктуации, учет которых необходим из-за особенностей дальнейшего численного счета [22,23]. В простейшем случае процесс $\xi(t)$ представляется белым шумом с моментами

$$\langle\xi(t)\rangle = 0; \quad \langle\xi(t)\xi(t')\rangle = 2D\delta(t - t'), \tag{13}$$

где интенсивность стохастического источника D везде принимается равной $10^{-25}\,\mathrm{s^{-1}}$.

На рис. 3 показан внешний вид поверхностей трения, сгенерированных с использованием широко известного холмового алгоритма (Hill Algorithm). Указанный алгоритм является итерационным и состоит в следующем. Сперва создается двумерный массив размером $N \times N$ и заполняется нулевыми значениями. Значение элемента массива — это высота z точки поверхности, индексы элемента — целочисленные координаты точки (x, y). Таким образом, изначально имеем плоскость. Затем случайным образом выбираются координаты (x_r, y_r), причем они могут выбираться и за пределами массива (поверхности). На этом же этапе генерируется еще одна случайная величина – радиус холма r. Диапазон случайных величин r существенно влияет на окончательный вид поверхности. Далее для всех элементов массива (точек поверхности) (x, y) рассчитывается значение высот z согласно формуле

$$z = r^2 - (x - x_r)^2 - (y - y_r)^2. \tag{14}$$

В случае $z(x, y) > 0$ высота z прибавляется к значению соответствующего элемента массива. Далее снова генерируются случайная точка (x_r, y_r), случайный радиус r, и описанные действия повторяются. Пускай процедура повторяется n раз. Отметим, что величина n существенно влияет на характер полученной поверхности. После окончания описанной процедуры проводится масштабирование высот поверхности z от 0 до 1, и полученная поверхность „опускается“ к нулевому уровню. Это легко

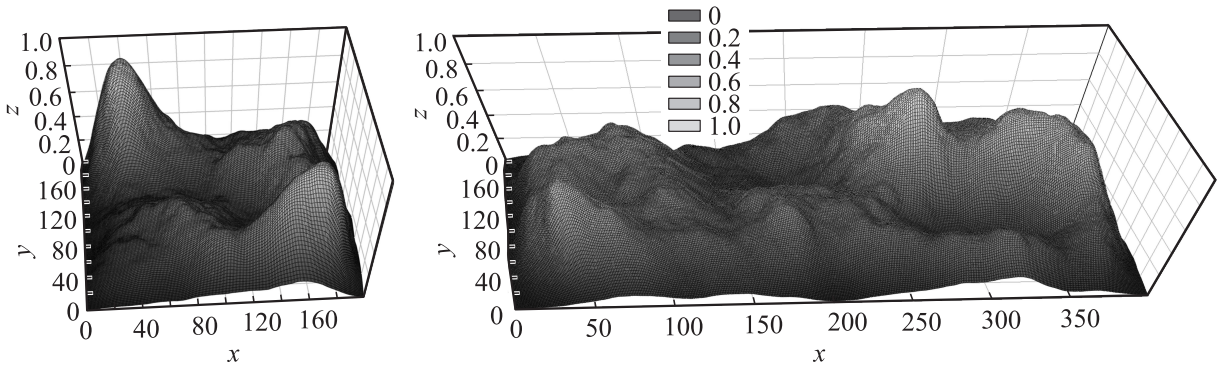

Рис. 3. Внешний вид верхней (слева) и нижней (справа) трущихся поверхностей, полученных с помощью применения холмового алгоритма (Hill Algorithm).

осуществить, если все высоты $z(x, y)$ пересчитать согласно соотношению

$$z := \frac{z - z_{\min}}{z_{\max} - z_{\min}}, \tag{15}$$

где $z_{\min}$, $z_{\max}$ — минимальное и максимальное значение z в массиве до масштабирования. На рис. 3 показаны поверхности, полученные таким образом. Верхняя поверхность (слева) в плоскости xy имеет 200×200 точек, нижняя (справа) — 400×200. Случайная величина радиуса r для обеих поверхностей выбиралась в диапазоне от 0 до 50. Количество итераций для верхней поверхности $n = 1000$, для нижней $n = 2000$, поскольку ее площадь в два раза больше. Координаты x_r, y_r при генерировании обеих поверхностей выбирались в диапазоне массива, т.е. для верхней поверхности обе координаты выбирались в пределах от 0 до 199, а для нижней — $y \in [0, 199]$, $x \in [0, 399]$. После формирования таким образом поверхностей каждое значение z было возведено в квадрат, что позволяет края поверхностей „прижать“ к низу, а выступы сделать более высокими по сравнению с общей картиной.

После того как поверхности получены, их необходимо подготовить для рассматриваемой задачи. Поскольку верхняя поверхность будет скользить по нижней, все ее точки следует зеркально отобразить относительно плоскости xy вниз, т.е. все элементы массива верхней поверхности пересчитываются согласно соотношению $z := 1 - z$. Далее, чтобы избежать пересечения плоскостей (значения высот верхней и нижней поверхностей находятся в диапазоне от 0 до 1), при каждой фиксированной координате y для верхней поверхности находится минимальное значение высоты $z_{\min}$, а для нижней — максимальное $z_{\max}$ и определяется величина $\Delta z = z_{\min} - z_{\max}$. Таким образом, получаем 200 значений Δz для всех имеющихся осей y. Из этих значений выбирается минимальное $\Delta z_{\min}$, и верхняя поверхность согласно замене ее элементов $z := z - \Delta z_{\min}$ приводится в соприкосновение с нижней по ходу движения. Теперь поверхности при перемещении не будут перекрываться, однако в некоторых точках (по крайней мере в одной) соприкасаются. Далее каждый элемент обоих массивов поверхностей умножается на величину $l = 10^{-9}$ m, после чего верхняя поверхность „приподнимается“ на 0.5 nm согласно замене $z := z + 0.5 \cdot 10^{-9}$ m. Выберем линейный размер сторон верхней квадратной поверхности $L = 1.2 \cdot 10^{-5}$ m, тогда ее площадь составит $A = L^2 = 0.144 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}^2$, а расстояние между точками по осям x и y на обеих поверхностях будет равно

$$S_{x,y} = \frac{L}{200} = 6 \cdot 10^{-8}\,\mathrm{m}. \tag{16}$$

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

На рис. 4 показаны масштабированные поверхности в виде карты высот, где координаты x и y уже представляют не номер точки, как на рис. 3, а пространственные координаты в микрометрах, где за начало отсчета взят левый нижний угол. На рисунке на легенде оттенками серого выделены значения высот поверхностей в нанометрах. Поскольку при подготовке верхней поверхности она была инвертирована, выступы на ней теперь отвечают меньшим значениям z. Поэтому для того, чтобы на рис. 4 на обеих поверхностях выступам соответствовали светлые участки, значения высот на левой поверхности увеличиваются от светлого к темному, а на правой — наоборот.

Рассмотрим кинетику системы, показанной на рис. 2, где в роли верхней и нижней трущихся поверхностей выступают поверхности, показанные на рис. 4. Для этого необходимо численно решать систему дифференциальных уравнений (10), (12) с учетом определений (4)–(7), (13). Поскольку область контакта содержит $200 \times 200 = 40000$ доменов, на каждом шаге численного интегрирования для всех доменов в отдельности определяются величины $h[i][j]$, $\varepsilon_{el}[i][j]$, $\varphi[i][j]$, $\sigma_{el}[i][j]$, $F[i][j]$, где i — целочисленный индекс точки поверхности по оси X, а j — индекс, соответствующий оси Y (оба индекса изменяются от 0 до 199). При этом полагаем, что температура смазки T постоянна для всех доменов, что соответствует случаю ультратонкой смазки, когда избыточное тепло, возникающее при движении в зоне

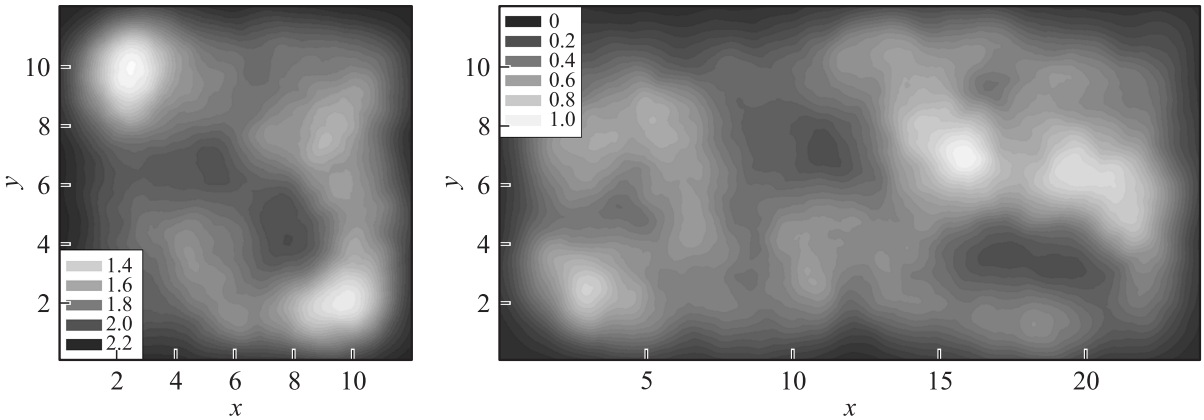

Рис. 4. Карта высот верхней (слева) и нижней (справа) трущихся поверхностей после масштабирования. Координаты x и y приведены в μm, высоты на легендах — в nm.

контакта, быстро передается поверхностям трения (термостату либо окружающей среде). Отметим, что в процессе движения верхней поверхности величины $h[i][j]$ будут изменяться, поскольку эти высоты представляют собой расстояние между соответствующими точками верхней и нижней трущихся поверхностей. Для учета этого факта вводится целочисленная переменная

$$s = \text{integer}\left(\frac{X}{S_{x,y}}\right), \tag{17}$$

описывающая сдвиг верхней поверхности относительно нижней. Здесь X — координата верхней трущейся поверхности, в начале движения при $t = 0$ равная нулю, а $S_{x,y}$ (16) — расстояние между точками поверхности по оси X. Тогда $h[i][j]$ легко определить как

$$h[i][j] = \text{top}[i][j] - \text{bottom}[i + s][j], \tag{18}$$

где top[200][200] — массив, содержащий масштабированные высоты верхней поверхности, bottom[400][200] — массив высот нижней. Из выражения (18) видно, что сдвиг верхней поверхности производится в направлении оси X, потому как координаты Y (индекс j) для обеих поверхностей в процессе движения не изменяются. При численном решении уравнения движения (10) будем на каждом временно́м этапе для всех доменов в отдельности численно решать дифференциальное уравнение (12), определяя текущие значения величин параметра порядка $\varphi[i][j]$, которые зависят от предыдущих значений массива $\varphi[i][j]$. В начале движения ($t = 0$) всем элементам массива $\varphi[i][j]$ присваивается значение $\varphi_0 = 0.5$, т.е. изначально смазка однородна по пространству и находится в твердоподобном состоянии. Далее, зная значения параметра порядка для всех доменов, вклад в силу трения от каждого из них рассчитывается по модифицированной формуле (6):

$$F[i][j] = \left[\sigma_{el}[i][j] + k\,\text{sgn}(V)\left(\frac{|V|}{h[i][j]}\right)^{\gamma+1}\right]\frac{L^2}{N^2}, \tag{19}$$

где $A = L^2 = 0.144 \cdot 10^{-9}\,\text{m}^2$ — ранее введенная площадь области контакта, N^2 — общее количество доменов. После расчета значений (19) действующая сила трения определяется как сумма всех элементов массива (всего $N^2 = 40\,000$), и это значение используется для решения кинетического уравнения (10). При этом находятся новые значения $X, V, \Delta X$, и процедура повторяется снова. В уравнении (19) скорость V не имеет индексов, поскольку верхняя поверхность является абсолютно жесткой и движется как единое целое.

Для численного интегрирования описанных уравнений используется итерационный метод Эйлера [22,23] с шагом по времени $\Delta t = 10^{-7}$ s. Итерационная процедура проводится до тех пор, пока значение целочисленной переменной сдвига s (17) не станет равным 200, т.е. пока верхняя поверхность не дойдет до конца нижней. При выбранных параметрах для этого требуется более $9 \cdot 10^7$ итераций, и на каждой итерации необходимо рассчитывать $N^2 = 40000$ значений массивов $h[i][j]$, $\varepsilon_{el}[i][j]$, $\varphi[i][j]$, $\sigma_{el}[i][j]$, и в итоге $F[i][j]$, что существенно замедляет численный счет, делая его неосуществимым на современном персональном компьютере. Однако, поскольку в рамках предлагаемого подхода домены не взаимодействуют друг с другом, значения массивов на каждом шаге также вычисляются независимо. Это позволяет для вычислений указанных значений применить разработанную компанией NVIDIA в 2007 г. параллельную архитектуру CUDA [30], которая используется для выполнения неграфических вычислений на универсальных графических процессорах (GPU) видеокарт компании NVIDIA. Поскольку уравнение движения (10) после вычисления значения полной силы трения F как суммы элементов (19) просчитывается на центральном процессоре (CPU), его частота также существенно влияет на время численного счета. Нами использовалась система на основе центрального процессора Intel Core 2 Quad Q9400, работающего на частоте 2.66 GHz, и видеокарта Palit GeForce GTX 570 Sonic 1280 MB, имеющая 480 универсальных процессоров, каждый из которых работает на частоте 1.4 GHz. При этом время выполнения про-

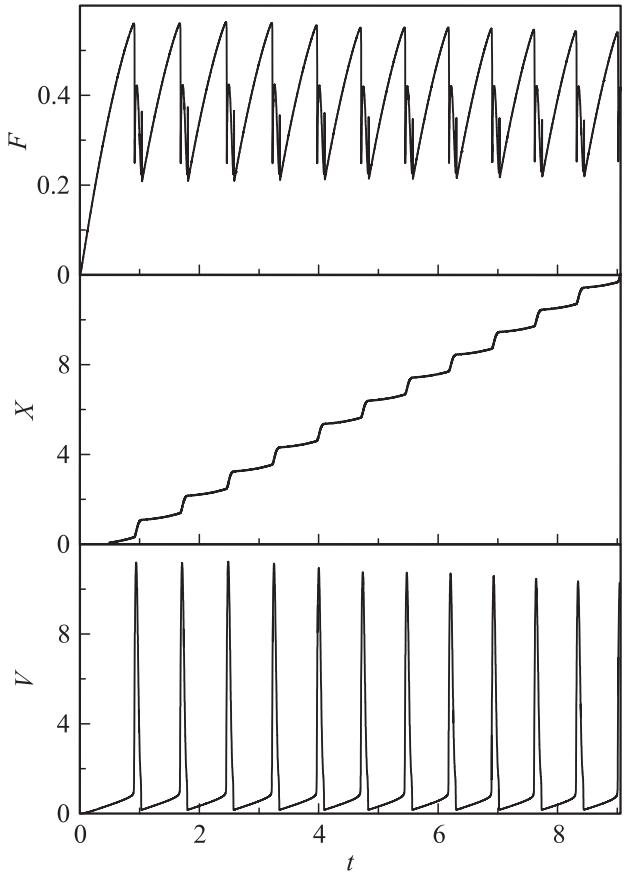

Рис. 5. Зависимости силы трения F (mN), координаты верхнего блока X (μm) и его скорости V (μm/s) от времени t (s) при параметрах рис. 1 и $k = 1.5 \cdot 10^5$ Pa $\cdot$ s$^{1/3}$, $\gamma = -2/3$, $\delta = 100\,\mathrm{J}^{-1} \cdot \mathrm{m}^3/\mathrm{s}$, $K = 600$ N/m, $M = 0.5$ kg, $T = 200$ K,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

граммы (расчета зависимостей, приведенных на рис. 5) составило 5 h 32 min.

Полученные в результате решения указанных уравнений зависимости показаны на рис. 5. При выбранной температуре T в состоянии покоя ($\varepsilon_{el} = 0$) смазка твердоподобна. В момент времени $t = 0$ свободный конец пружины начинает равномерное движение со скоростью $V_0 = 1.4\,\mu$m/s. На начальном этапе переменная s, описывающая сдвиг, принимает нулевое значение, поэтому с ростом скорости V для всех доменов возрастают компоненты силы трения (19). За счет роста скорости также увеличиваются значения упругих деформаций $\varepsilon_{el}[i][j]$, что приводит к росту упругих компонент напряжений $\sigma_{el}[i][j]$. Поскольку сначала скорость V существенно меньше значения V_0, пружина растягивается, и растяжение ΔX увеличивается. С течением времени увеличивается координата X, устанавливается ненулевое значение s (17) и происходит пересчет $h[i][j]$. Это приводит к нарушению периодичности зависимостей, что особенно видно на зависимости $V(t)$. Для каждого домена выполнение условия плавления $V > V_{c0}$ будет происходить в различные моменты времени, поскольку критическая скорость V_{c0} (8) пропорциональна расстоянию между „плоскостями“ поверхностей $h[i][j]$, которые ограничивают соответствующие домены. Поэтому в каждый момент времени смазка в одних местах поверхности твердоподобна, а в других жидкоподобна. Однако, как видно из рисунка, существуют моменты времени, когда скорость движения V многократно увеличивается. Эта ситуация соответствует полному плавлению смазочного материала, поскольку при многократном увеличении V для всех доменов выполняется условие $V > V_{c0}$. При плавлении напряжения $\sigma_{el}[i][j]$ принимают нулевое значение, за счет чего и возрастает скорость проскальзывания верхнего блока V, поскольку упругие составляющие сил трения $F[i][j]$ становятся равными нулю. При этом блок быстро перемещается на большое расстояние, о чем свидетельствует увеличение угла наклона зависимости $X(t)$ к оси абсцисс после плавления. Поскольку теперь блок движется со скоростью V, которая существенно превышает скорость движения свободного конца пружины V_0, пружина сжимается, уменьшается натяжение ΔX, а вместе с ним и упругая сила $K\Delta X$, приводящая к движению. Условие $V < V_c^0$ опять же для всех доменов происходит в разное время, поэтому при затвердевании формируется неоднородная доменная структура. Стоит отметить, что хотя зависимости, приведенные на рис. 5, не являются строго периодическими, они близки к периодическому виду, что подтверждают также исследования поведения взаимодействующих шероховатых поверхностей при их взаимном перемещении с учетом упругости [31]. Отметим, что прерывистый режим движения $stick{-}slip$, показанный на рис. 5, наблюдался Боуденом и Тейбором более 50 лет назад [32] при проведении экспериментов по определению влияния молекулярного веса полимеров на коэффициент трения.

Рассмотрим более подробно переход между кинетическим режимом скольжения и сухим трением. На рис. 6 приведены зависимости силы трения F и скорости скольжения V от времени, показанные на рис. 5, однако для ограниченного промежутка времени. На рисунке выбраны четыре момента времени, для которых приведены распределения значений параметра порядка φ по площади скольжения. Координаты x и y на этих рисунках соответствуют значениям, показанным на рис. 4 для верхней трущейся поверхности. Координаты X точек поверхностей верхнего трущегося блока могут быть рассчитаны как

$$X = x + sS_{x,y}, \tag{20}$$

где переменная сдвига s (17) для 4 увеличивающихся на рис. 6 моментов времени принимает значения 161, 162, 174, 174. Проанализируем полученные данные. Как видно на зависимости $F(t)$, в момент времени $t = 7.57$ s в системе реализуется режим сухого трения, характеризующийся высоким значением силы трения и малой величиной скорости сдвига V. На соответствующем пространственном распределении $\varphi(x, y)$ видно, что параметр порядка практически везде принимает значение $\varphi > 0$, однако присутствуют темные участки, где смазка близка к жидкоподобному состоянию. Поскольку

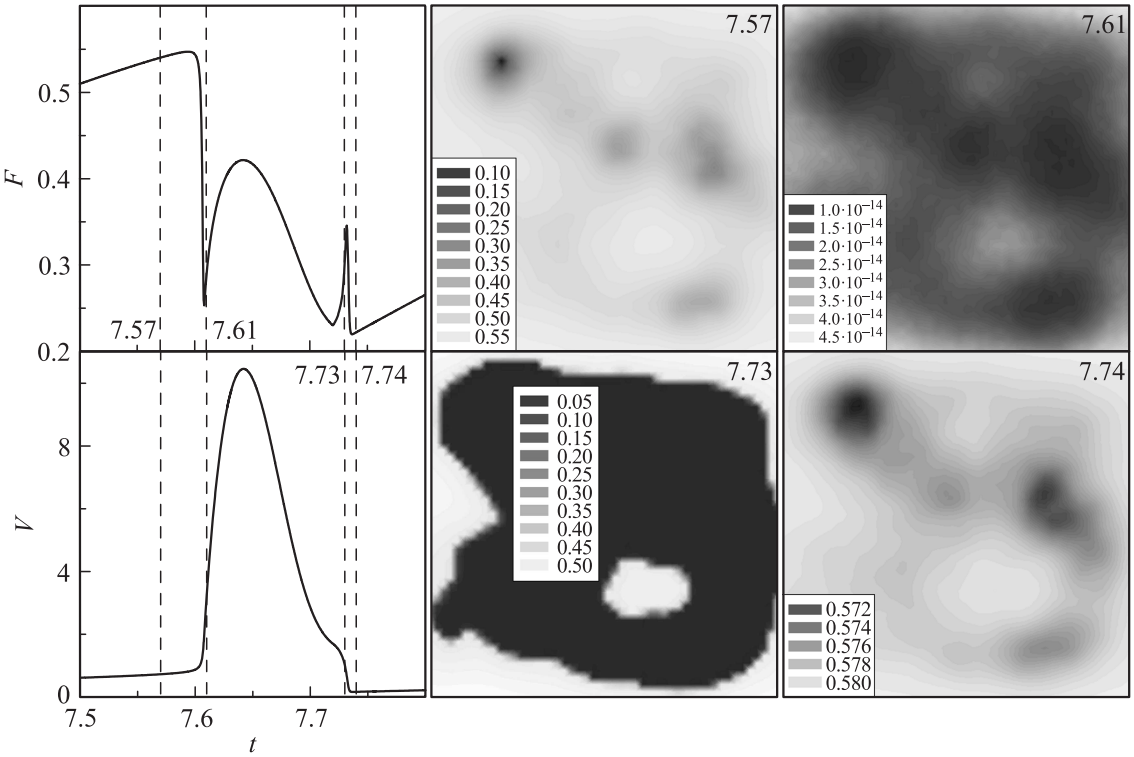

Рис. 6. Зависимости $F(t)$ и $V(t)$, приведенные на рис. 5 на отрезке времени $t \in [7.5, 7.8]$ (s), и распределение значений параметра порядка $\varphi(x, y)$ по площади контакта поверхностей для четырех выбранных моментов времени $t = 7.57, 7.61, 7.73, 7.74$ (s).

количество доменов с твердоподобной смазкой многократно превышает количество доменов с жидкоподобной структурой, устанавливается режим сухого трения. Момент времени $t = 7.61$ s соответствует режиму скольжения, поскольку сила трения F резко уменьшается, а скорость сдвига V растет. Если посмотреть на соответствующую зависимость $\varphi(x, y)$, видно, что по всей площади контакта реализуются значения $\varphi \sim 10^{-14}$, что отвечает уровню выбранной интенсивности белого шума D (13). Таким образом, все домены находятся в расплавленном состоянии. В следующий рассматриваемый момент времени $t = 7.73$ s происходит увеличение силы трения F, а также снижение скорости V (на зависимости $V(t)$ при возрастании F в окрестности выбранного времени наблюдается перегиб). Таким образом, система переходит в режим сухого трения. Однако, как видно из соответствующего рисунка $\varphi(x, y)$, не все домены при этом имеют твердоподобную структуру. Жидкоподобной структурой в этот момент времени обладает даже большее количество доменов (темные участки зависимости). И после полного затвердевания ($t = 7.74$ s) все домены характеризуются значением $\varphi > 0$, однако на соответствующей зависимости $\varphi(x, y)$ есть более темные участки, для которых модуль сдвига принимает меньшее значение. Отметим, что зависимости $\varphi(x, y)$ для последних двух моментов времени характеризуются одинаковыми величинами $s = 174$. Таким образом, их принципиальное отличие вызвано не изменением набора значений $h[i][j]$, а релаксационными процессами в смазочном материале. Если же параметр s при движении долгое время остается постоянным, картина $\varphi(x, y)$ полностью определяется набором $h[i][j]$ при других фиксированных параметрах. Это происходит за счет того, что при выбранном значении кинетического коэффициента δ происходит быстрая релаксация параметра порядка φ к устойчивому значению, определяемому величиной h. Однако в нанотрибологических системах по сравнению с объемными смазками времена релаксации могут отличаться на порядки величин в зависимости от созданных условий, поэтому варьированием значения δ при необходимости можно добиться качественного описания различных наблюдаемых экспериментально эффектов, таких, например, как эффекты памяти, когда время релаксации напряжений многократно превышает время наблюдения процессов в эксперименте [9]. Отметим, что зависимость силы трения от времени, приведенная на рис. 6, имеет особенности (два максимума после плавления), подробно описанные ранее в работе [23].

Заключение

В работе рассматривается теоретическая модель граничного трения, основанная на теории фазовых переходов Ландау. Модель позволяет представить наблюдаемый экспериментально прерывистый режим движения как периодические фазовые переходы первого рода между структурными состояниями ультратонкой пленки

смазочного материала, зажатой между двумя твердыми поверхностями, обладающими наноразмерными неровностями. Выяснено, что в процессе трения неровных поверхностей смазка по площади контакта представляет доменную структуру, где присутствуют жидкоподобные и твердоподобные участки, вносящие различный вклад в общую силу трения. Показано, что для шероховатых поверхностей зависимость силы трения от времени хотя и не является строго периодической, но близка к таковой, что совпадает с известными экспериментальными данными. Для получения результатов была применена параллельная архитектура CUDA, разработанная компанией NVIDIA и широко используемая в настоящее время для выполнения неграфических вычислений на большом количестве универсальных графических процессоров современных видеокарт. Поскольку данная технология является сравнительно новой, ранее нами рассматривалось поведение атомарно-гладких поверхностей бесконечного размера, где в каждой области поверхности смазка имеет одинаковые свойства. Выводы настоящей работы позволяют расширить и обобщить полученные ранее результаты для атомарно-гладких поверхностей.

Частично работа выполнена при поддержке МОН Украины в рамках проекта „Моделирование трения металлических наночастиц и граничных пленок жидкостей, которые взаимодействуют с атомарно-гладкими поверхностями“, № 0112U001380. Работа поддержана стипендией КМУ.

Список литературы

[1] *Persson B.N.J.* Sliding friction. Physical principles and applications. NY: Springer-Verlag, 2000. 515 p.
[2] *Israelachvili J.* // Surf. Sci. Rep. 1992. Vol. 14. N 3. P. 109–159.
[3] *Ohnishi S., Kaneko D., Gong J.P., Osada Y., Stewart A.M., Yaminsky V.V.* // Langmuir. 2007. Vol. 23. N 13. P. 7032–7038.
[4] *Yamada S.* // Langmuir. 2008. Vol. 24. N 4. P. 1469–1475.
[5] *Demirel A.L., Granick S.* // J. Chem. Phys. 1998. Vol. 109. N 16. P. 6889–6897.
[6] *Reiter G., Demirel A.L., Peanasky J., Cai L.L., Granick S.* // J. Chem. Phys. 1994. Vol. 101. N 3. P. 2606–2615.
[7] *Hardy W., Bircumshaw J.* // Proc. R. Soc. Lond. A. 1925. Vol. 108. P. 1–27.
[8] *Попов В.Л.* // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 5. С. 100–110.
[9] *Yoshizawa H., Israelachvili J.* // J. Phys. Chem. 1993. Vol. 97. N 43. P. 11 300–11 313.
[10] *Popov V.L.* // Solid State Commun. 2000. Vol. 115. N 7. P. 369–373.
[11] *Filippov A.E., Klafter J., Urbakh M.* // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. N 13. P. 135 503–4.
[12] *Ляшенко Я.А., Хоменко А.В., Метлов Л.С.* // ЖТФ. 2010. Т. 80. Вып. 8. С. 120–126.
[13] *Ляшенко Я.А., Хоменко А.В., Метлов Л.С.* // Трение и износ. 2011. Т. 32. № 2. С. 157–170.
[14] *Braun O.M., Naumovets A.G.* // Surf. Sci. Rep. 2006. Vol. 60. N 6–7. P. 79–158.
[15] *Sivebaek I.M., Samoilov V.N., Persson B.N.J.* // Langmuir. 2010. Vol. 26. N 11. P. 8721–8728.
[16] *Robbins M.O., Müser M.H.* Computer Simulations of Friction, Lubrication and Wear. In Modern Tribology Handbook / Edited by B. Bhushan. Boca Raton: CRC Press, 2001. P. 717–765; cond-mat/0001056.
[17] *Хоменко О.В., Ляшенко Я.О.* // Журн. фіз. досл. 2007. Т. 11. № 3. С. 268–278.
[18] *Хоменко О.В., Ляшенко Я.О., Борисюк В.М.* // УФЖ. 2009. Т. 54. № 11. С. 1142–1151.
[19] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика, Ч. 1. М.: Наука, 1995. 605 с.
[20] *Berman A.D., Ducker W.A., Israelachvili J.N.* // Langmuir. 1996. Vol. 12. N 19. P. 4559–4563.
[21] *Luengo G., Israelachvili J., Granick S.* // Wear. 1996. Vol. 200. N 1–2. P. 328–335.
[22] *Ляшенко Я.А.* // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 6. С. 125–132.
[23] *Ляшенко Я.А.* // ЖТФ. 2012. Т. 82. Вып. 1. С. 19–28.
[24] *Попов В.Л.* // Письма ЖТФ. 1999. Т. 25. Вып. 20. С. 31–38.
[25] *Lyashenko I.A., Khomenko A.V., Metlov L.S.* // Tribol. Int. 2011. Vol. 44. N 4. P. 476–482.
[26] *Sivebaek I.M., Samoilov V.N., Persson B.N.J.* // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. N 3. P. 036 102–4.
[27] *Ахматов А.С.* Молекулярная физика граничного трения. М.: Физматгиз, 1963. 472 с.
[28] *Ляшенко Я.А.* // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 5. С. 115–121.
[29] *Ландау Л.Д., Халатников И.М.* // ДАН СССР. 1954. Т. 96. № 3. С. 469–472.
[30] *Сандерс Д., Кэндрот Э.* Технология CUDA в примерах. Введение в программирование графических процессоров: пер. с англ. А.А. Слинкина, научный редактор А.В. Боресков. М.: ДМК Пресс, 2011. 232 с.
[31] *Tartaglino U., Samoilov V.N., Persson B.N.J.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2006. Vol. 18. N 17. P. 4143–4160.
[32] *Bowden F.P., Tabor D.* The friction and lubrication of solids. Oxford: The Clarendon Press, 1954. 337 p.