

超滑和界面摩擦及耗散过程*

——关于摩擦机理微观研究的思考与展望

胡元中, 王 慧, 邹 鲲, 张 涛

(清华大学 摩擦学国家重点实验室, 北京 100084)

摘要: 评述了近年来关于摩擦现象基础研究的进展与成果, 包括超滑的分子动力学模拟, 界面摩擦试验, 表面微观结构的相称性理论以及摩擦的能量耗散过程等。肯定了超滑的模拟结果及其理论解释对于摩擦机理和控制研究的启迪和促进作用, 分析了模拟结果与现实世界差异的深层次原因, 并指出正是这一差别将促使人们超越经典力学的框架, 为探索和发现尚未认识的摩擦机制创造新的机遇。

关键词: 超滑; 界面摩擦; 耗散过程

中图分类号: TH117.2

文章标识码: A

文章编号: 1004-0595(2000)04-0313-04

摩擦是一种常见的自然现象, 它几乎无处不在, 以致摩擦的概念被延伸到了社会领域和人际关系。对摩擦的科学探索始于 15 世纪的达·芬奇, 经过阿芒汤和库仑的补充完善, 形成了人们熟知的摩擦三定律。遗憾的是, 至今我们对摩擦的认识与这些先辈们相比并无质的飞跃。在润滑、摩擦和磨损这 3 个摩擦学分支中, 摩擦也许是最薄弱的研究领域, 许多常见的摩擦现象仍是尚未破译的科学之谜。

1 摩擦机理研究的挑战和机遇

本世纪 40 年代摩擦研究曾经有过一个较大的飞跃, 这主要归功于 Bowden 等^[1]的杰出工作。他们以粘着点上材料或表面膜的剪切强度与表面粗糙峰接触的平均应力的比值来表示摩擦系数, 并成功地解释了许多摩擦现象。目前多数研究者认为, 摩擦的起源主要与表面粗糙度的存在有关, 涉及粗糙峰的啮合、变形、粘着、剪切和犁沟等, 在此基础上形成了当前宏观摩擦理论的基本框架。

20 世纪末, 精密机械和微机电系统的发展对摩擦研究提出了新的挑战。人们发现, 即使把负荷引起的塑性变形、粘着和粗糙度的影响抑制到最低限度, 实现原子级光滑表面的分子接触时, 即达到所谓的“界面摩擦”状态时^[2], 摩擦依然存在, 但是其规律却与宏观摩擦有明显的不同^[3]。显然此时分子和原子间力的相互作用成为摩擦的主要起因。那么, 从分子运

动的观点来看, 摩擦的本质究竟是什么? 界面摩擦过程中能量通过何种途径耗散并最终转化为热? 对于这些问题的认知和理解, 不仅有助于寻求降低摩擦的途径和实现摩擦的主动控制, 而且可能导致对摩擦起源认识的飞跃。

近年来, 原子力显微镜(AFM), 表面力仪(SFA)和石英晶体微天平(QCM)等仪器的研制成功对摩擦的微观研究起了很大的推动作用, 而分子动力学(MD)模拟技术的发展为研究摩擦过程能量耗散的微观机制提供了有效的理论分析工具。当今社会对机电系统和微纳米技术的需求已经吸引了越来越多的物理学家和化学家加盟于摩擦机制的微观研究。种种迹象表明, 关于摩擦机理的研究在近年内可能会有所突破。

2 界面摩擦的研究

微观试验装置的发展和分子动力学模拟的日趋成熟, 使人们有可能研究一种最单纯的摩擦状态, 即“界面摩擦”。它是指分子和原子直接对一个理想(原子级)光滑的晶体表面相对滑动而产生的摩擦^[2]。原子力显微镜的探针、有序分子膜、光滑的固体表面以及液态或晶态吸附层都是原子和分子的某种集合, 因此它们相对于一个理想晶体表面的滑动摩擦都属于界面摩擦。由于不存在粗糙峰的塑性变形和机械作用, 因而界面摩擦是研究摩擦的分子本源和微观机制

* 国家自然科学基金资助项目(59875042; 59735110)。

1999-12-13 收到初稿, 2000-05-29 收到修改稿/联系人胡元中

胡元中 男, 53 岁, 博士, 研究员, 博士生导师, 目前主要从事分子动力学模拟和润滑力学研究

的理想状态

日本学者 Hirano 等^[4]曾对 2 个原子级光滑晶体表面的相对滑动进行了分子动力学模拟, 结果发现摩擦力完全消失, 这就是盛传一时的所谓“超滑”(superlubricity)或零摩擦状态。但当 2 个滑动表面的晶体尺度和取向完全相同, 即微观结构处于“相称”(commensurate)状态时, 未观察到这种零摩擦状态。Robbins 等^[2]从理论上对零摩擦状态进行了解释, 他们认为, 在界面摩擦条件下, 摩擦主要来自分子间力的相互作用, 即取决于表面间原子分子相互作用的势函数。当接触表面达到能量最低状态, 即势能处在某个谷底时, 表面须克服势垒才能发生相对运动, 这就是静摩擦力的发生机制。如果 2 个表面的微结构不相称(incommensurate), 由于分子间作用势的随机叠加, 表面间相互作用的能量将与表面的位置无关, 而不可能形成能量最低的势谷, 结果导致超滑状态。我们将上述观点称为“摩擦的相称性理论”。

为了说明相称性对摩擦的影响, 图 1 给出了一晶

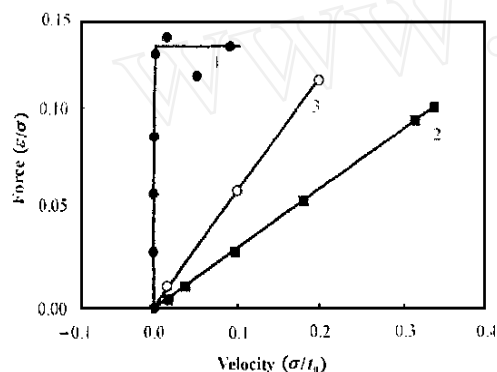


Fig 1 Simulation results of the effects of commensurability on friction

图 1 微观结构相称性对摩擦影响的模拟结果

体与其表面上单分子固体吸附层之间摩擦力的计算机模拟结果^[5]。当吸附层的分子结构与晶体结构相称时明显表现出静摩擦的特征(图 1 中曲线 1 所示), 即摩擦力在启动瞬间迅速增大, 此后大体保持不变。而当二者处于不相称状态时, 摩擦力(图 1 曲线 2 所示)则随速度线性增加, 其数值甚至比晶体与液体吸附层之间的摩擦力(图 1 曲线 3 所示)还要小。这表明两接触表面微观结构及取向的相称性对其摩擦有明显的影响。

除了理论分析和模拟研究之外, 近十多年来不少研究者在界面摩擦试验中利用扫描隧道/原子力显微镜^[6,7]、表面力仪^[8]和石英晶体微天平^[3], 通过选配偶

件表面及润滑分子膜研究实现超滑的条件。初步研究结果表明: 理想晶体表面相对滑动的摩擦系数在较大的范围内变化, 滑动摩擦的大小与表面的相称性有关, 当表面微观结构不相称时, 滑动中没有探测到静摩擦力, 摩擦随滑动速度线性增加, 表现出类似粘性耗散的特性。由于相对滑动表面的微观结构一般是不相称的, 根据上述理论和实验结果, 又该如何理解普遍存在的静摩擦现象呢? Robbins 等^[9]认为表面间第三介质的存在是导致静摩擦的关键因素。第三介质可能是液体润滑剂、有序分子膜、各种表面膜或磨损颗粒等。我们^[10]在关于薄膜流变性能的研究中发现, 当液体被约束在分子尺度的空间中时会发生固化相变。静摩擦的起源在于克服类固薄膜的剪切屈服强度, 即表面间的剪应力超过薄膜的屈服强度时产生相对滑动^[11]。从摩擦的相称性理论来看, 介于表面间的液体超薄膜能对原来不相称的晶体表面起一种协同作用, 产生类似相称的界面结构, 从而引起滑动势垒和静摩擦。这种理论模型已经由分子动力学模拟初步证实^[9]。超薄膜的相变理论和协同理论都能解释静摩擦的起源, 但协同理论同时还可解释表面膜和磨粒等其它第三介质的作用, 因此适用范围更广。

3 摩擦的耗散过程研究

在晶体界面的相对滑动试验中摩擦并未完全消失, 有时还相当可观^[2]。这说明除了粗糙峰啮合、塑性变形和粘着等传统的摩擦机理外, 还存在着某些尚未为人们所认识的能量耗散过程而导致摩擦的产生。因而关于界面能量耗散过程的研究对于理解摩擦的起源和摩擦控制具有重要的意义。目前, 声子发生和电子激励这 2 种能量耗散过程已经引起研究者的注意。声子与原子振动相关联, 这种振动受到界面滑动机械激励, 其能量最终以声波或热的形式耗散。电子激励摩擦是由金属界面上导电电子受滑动诱导的激发而产生的。电子激励涉及到量子理论, 这方面的研究刚刚起步, 目前对其机制的认识尚不清楚。

利用分子动力学模拟能跟踪观察粒子的运动, 因此该方法是研究能量耗散的具体过程及其分子本源的重要手段。对金刚石晶体表面的模拟表明^[12], 相对滑动诱发界面分子相互“碰撞”而发生振动, 然后这种运动逐渐向基体材料内部转移, 振动能量最终通过热交换而耗散。模拟还表明, 介于滑动表面间的某些碳氢分子能够有效地抑制滑动激励的分子振动而减小摩擦。这从另一个角度解释了润滑剂的作用机理。Xiao 等^[13]采用原子力显微镜考察自组装膜表面滑动

架,去探索和发现未知的摩擦形成机制

e 当两个表面静态接触时必然处于能量较低的平衡状态,而模拟则显示,如果两表面的微观结构不相称,则该表面的能量状态必与其相对位置无关,由此得出超滑的结论 根据非平衡态热力学的最新理论,对这种差异的一个可能的解释是,由界面上大量分子参与的某种自组织过程引起表面能量状态的变化,而使非相称接触表面处于最小位能状态,并最终导致摩擦 虽然人们现在还不清楚这一过程的具体演变方式,但相信在这方面的深入研究将会深化人们对摩擦本质的认识

参考文献:

- [1] Bowden F P, Tabor D. The Friction and Lubrication of Solids [M]. Oxford: Oxford Press, 1958
- [2] Robbins M O, Krim J. Energy dissipation in interfacial friction [J]. MRS Bulletin, 1998, 23 (6): 23~ 26
- [3] Krim J. Friction at the atomic scale[J]. SciAm, 1996, 275: 74~ 80
- [4] Hirano M, Shinjo K. Atomic locking and friction[J]. Phys Rev B, 1990, 41: 11 837~ 11 851
- [5] Cieplak M, Smith E D, Robbins M. Molecular origin of friction—the force on adsorbed layers[J]. Science, 1994, 265: 1 209~ 1 212
- [6] Hirano M, Shinjo K, Kaneko R, *et al* Observation of superlubricity by scanning tunneling microscopy [J]. Phys Rev Lett, 1997, 78: 1 448~ 1 451
- [7] 王德国, 高芒来, 张嗣伟. 石英岩表面分子沉积膜的微观摩擦性能的试验研究[J]. 摩擦学学报, 1999, 19(1): 28~ 32
- [8] Mao G Z, Tsao Y H, Tirrell M, *et al* Self-assembly of photopolymerizable bolaform amphiphile monolayers and multilayers[J]. Langmuir, 1993, 9: 3 461~ 3 470
- [9] He G, Muser M, Robbins M. Adsorbed layers and the origin of static friction[J]. Science, 1999, 284: 1 650~ 1 652
- [10] 胡元中, 王慧, 郭炎, 等. 超薄油膜润滑的分子动力学模拟[J]. 摩擦学学报, 1995, 15 (2): 138~ 142
- [11] Granick S. Motions and relaxations of confined liquids[J]. Science, 1991, 253: 1 374~ 1 379
- [12] Harrison J, White C T, Colton R J, *et al* Molecular-dynamics simulation of atomic-scale friction of diamond surfaces [J]. Phys Rev B, 1992, 46: 9 700~ 9 708
- [13] Xiao X, Hu J, Charych D H, *et al* Chain length dependence of the frictional properties of alkylsilane molecules self-assembled on Mica studied by atomic force microscopy [J]. Langmuir, 1996, 12: 235~ 237
- [14] Harrison J A, Perry S S. Friction in the presence of molecular lubricant and solid/hard coatings[J]. MRS Bulletin, 1998, 23 (6) 27~ 31
- [15] 龚少明. 非平衡态统计力学[M]. 上海: 复旦大学出版社, 1989
- [16] Granick S. Soft matter in a tight spot[J]. Physics Today, 1999, 7: 26~ 31

Superlubricity, Interfacial Friction and Dissipation ——Some Aspects on Fundamental Study of Friction

HU Yuan-zhong, WANG Hui, ZOU Kun, ZHANG Tao

(State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Beijing 100084)

Abstract: The recent progress in fundamental study of friction, including molecular dynamics simulation of superlubricity, interfacial friction testing, commensurate theory on the origin of friction, and the investigation of energy dissipation during friction process, is reviewed. It is true that the simulation of superlubricity and its theoretical explanation are inspiring to promote the fundamental study and practical control of friction, but the difference between computed results and the physical reality deserves a further investigation. It is the difference that encourages us to go beyond the classical mechanics and to explore at-depth the unknown world of friction.

Key words: superlubricity; interfacial friction; dissipation process