

无磨损摩擦的原子理论

张 涛, 王 慧, 胡元中

(清华大学 摩擦学国家重点实验室, 北京 100084)

摘要: 对描述原子级光滑表面之间的无磨损界面摩擦的微观过程的 2 个理论模型进行了综述, 探讨了 Frenkel-Kontorova (FK) 模型的非线性静态和动态性质的复杂性. 根据 FK 模型, 静态特性在很大程度上依赖于表面晶格常数间的公度性, 而动态特性则可分为周期解、准周期解和混沌解加以讨论.

关键词: 摩擦; 模型; 独立振子模型; Frenkel-Kontorova 模型

中图分类号: TH117.2

文章标识码: A

文章编号: 1004-0595(2001)05-0396-05

摩擦过程是非线性的且远离平衡态的热力学过程. 有关滑动摩擦的研究是物理学中最古老且应用最重要的问题之一^[1]. 但人们对摩擦中的基本微观过程知之甚少, 至今还未建立既可以解释摩擦中的宏观现象, 又可以据此由整体和表面特性来计算摩擦力的被普遍接受的理论. 20 世纪 80 年代以来, 随着实验技术的进步和计算手段的升级, 尤其是随着原子力显微镜 (AFM)、表面力仪 (SFA)、石英晶体微平衡仪 (QCM) 和分子动力学模拟技术的发展, 关于摩擦机理的研究又重新得到关注^[2,3].

为理解摩擦的微观机制, 实现微纳米系统中的摩擦控制, 需要在排除粗糙度、粘着、塑性变形和磨损等因素的影响后, 研究一组原子或分子对于原子级光滑

表面作相对滑动时能量耗散和摩擦形成的过程. 此类摩擦现象被称为“界面摩擦”, 在工程中对应于弹性滑动的无磨损摩擦. 本文介绍无磨损滑动摩擦中采用独立振子模型和 FK 类模型针对一些问题的求解和结果.

1 独立振子模型

独立振子模型, 有时称为 \mathcal{D} (Independent Oscillator) 模型, 最早由 Tomlinson^[4] 在 1929 年提出, 他首次用微观模型来解释摩擦现象, 但当时并未得到重视. 自 20 世纪 80 年代以来, \mathcal{D} 模型被重新认识, 并被用来解释大量实验和模拟结果^[5-7].

\mathcal{D} 模型的示意图如图 1. 固体表面 A 和 B 相对

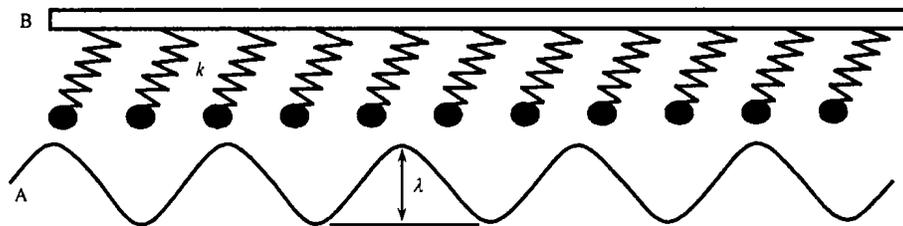


Fig 1 Diagram of \mathcal{D} model

图 1 独立振子模型

滑动, A 简化为强度为 λ 的一维周期势场, B 表面原子之间无相互作用, 通过柔性单键 (即刚度为 k 的弹簧, 其势能为抛物线势 V_{BB}) 连接到代表 B 其余部分的刚性支撑上, 这些弹簧通过向支撑传递能量代表对 B 表面原子激发态能量的耗散, 这个简单模型包括了

无磨损摩擦的主要元素, 即可移动的表面原子、周期性表面作用势函数及表面产生振动能量的耗散机制.

B 表面原子间没有相互作用, 仅研究某个原子 B_0 的运动. B_0 的运动取决于经周期势场调制后的综合势能 V_s , 图 2 所示为强表面作用时的情形, 其中黑

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (59875042, 59735110).

收稿日期: 2000-09-28; 修改日期: 2000-12-06/联系人张涛

作者简介: 张涛, 男, 1976 年生, 博士研究生, 主要从事界面摩擦的模拟和实验研究

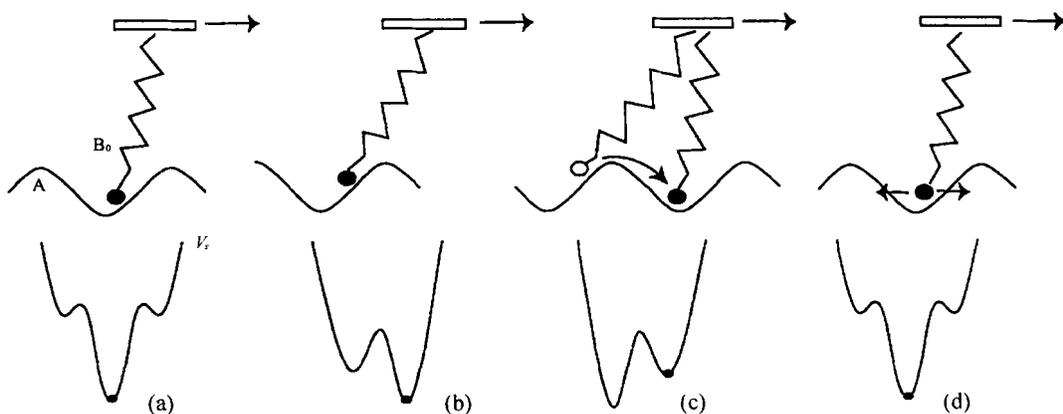


Fig 2 Quasistatic sliding process and potential variation of D model representing the situation of strong interfacial interaction

图 2 强表面作用时独立振子模型的准静态滑动过程及势能变化

点代表 B_0 在 V_s 曲线上的位置。滑动开始时, B_0 的位置对应于势能的最小值, 如果 A 准静态滑动(即滑动速度远小于固体变形弛豫的速度), V_s 变化足够慢, B_0 保持在 V_s 的最小值位置, 当周期势场幅值较大时[如图 2(c)], B_0 突然跳到势能底部, 激发振动, 能量不可逆地在固体中以声子的形式耗散掉, 周期势场“拉扯”键势, 由平动转化储存在 B 中的变形能变成振动能量(热), 而周期势场幅值较小时, 由于 V_s 无局部极小值, B_0 绝热且无摩擦地滑动

摩擦耗散出现的条件是 V_s 有局部极小值, 即 V_{AB} 最大处的曲率大于键势 V_{BB} 的曲率。对于正弦的 V_{AB} , 曲率与幅值或强度等价。所以当 k 一定时, 表面作用势能强度在临界值之下, 没有能量耗散, 摩擦力为 0; 在临界值之上, 摩擦力随着作用强度的增加而增大

Tomanek 等^[8]使用稍有不同的 D 模型来计算 AFM 探针在石墨基体上的摩擦力, 通过水平弹簧拉动探针, 对于硬弹簧, 平均摩擦力为 0; 对于软弹簧, 探针位移相对驱动有较大的延迟, 越过势垒前弹簧拉伸很长, 越过势垒后探针跳至新的平衡点, 产生振动,

引起摩擦耗散, 其中迟滞起重要作用

Gyalog 等^[9, 10]研究了独立振子的扩展模型, 其中原子在基体势场中以二维方式运动, 以模拟 AFM 探针在表面上的运动。和一维模型一样, 随着弹簧刚度的降低, 发生从平滑滑动到快速跳动的转变, 转变点依赖于滑动方向等因素

以上的结果都是在准静态的情况下得到的。在弱阻尼作用下(相应于较高的滑动速度), 将会出现独立振子和以恒速运动的周期势场间的共振, 产生与速度相关的动摩擦力。在弱表面作用强度下这些共振可解析计算得到, 而在强作用时则出现强烈非线性特性。Helman 等^[11]使用与 Tomanek 相同的模型计算了动态下的摩擦力, 观察到了复杂的分岔、混沌运动和迟滞等现象, 并发现动摩擦力是随滑动速度而变化的多值函数

2 FK 模型

D 模型的主要不足在于无法考虑表面原子间的相互作用的影响, FK 模型则提供了 1 种对界面摩擦现象更完整的描述。如图 3 所示, 考虑 1 个线性原子

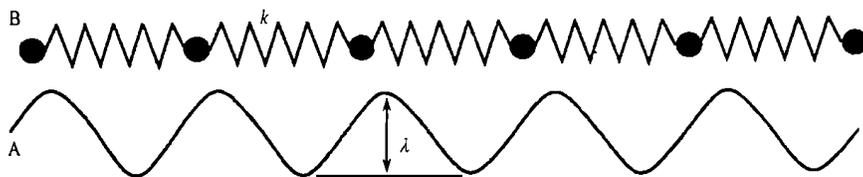


Fig 3 Diagram of Frenkel-Kontorova Model

图 3 Frenkel-Kontorova 模型

链在一维周期势场中的运动, 链中原子间相互作用由 弹簧模拟。这个模型最早由 Frenkel 等^[12]于 1938 年

为研究晶体点阵位错提出,近年来已成为低维非线性物理中的基本模型之一^[13],可用来描述各种非线性物理现象^[14],如界面摩擦、位错动力学、晶体表面上单层吸附膜的动力学、公度-不公度相变^[15]、电荷密度波 (Charge Density Waves) 的传播和铁电畴垒等。

原子链中序号为 j 的原子的无量纲运动方程为:

$$\frac{d^2x_j}{dt^2} + \gamma \frac{dx_j}{dt} = (x_{j+1} + x_{j-1} - 2x_j) + b \sin 2\pi x_j + F_{ex} \quad (1)$$

式中: γ 为原子链内部能量耗散的阻尼 (静态分析时为 0), b 为反映周期势场和原子链内部作用强度相对大小的值, 即 $b = \lambda/k$, F_{ex} 是维持链运动的无量纲外力。

有很多类似模型是基于 FK 模型的, 如考虑周期势场中 2 条原子链^[16, 17]或多条链^[18, 19]的运动, 或改变周期势场为准周期^[20], 或考虑基体作用后的 FKT 模型^[21, 22]等, 但分析方法基本一致。

2.1 FK 类模型的静态分析

静态分析主要是求基态解。由势能最小原理, 滑动的原子链和周期势场都尽量使原子落在其势能最低处, 即按各自晶格常数 a_0 和 a_s 分布, 此时可分度数 $c = a_0/a_s$ 起关键作用: 当 c 为有理数时, 称 A 和 B 是公度的 (commensurate), 两者的势能最低点可以重合, 原子链处于最低的势能点, 相应的静摩擦力表现为较大; 当 c 为无理数时, 称 A 和 B 为不公度的 (incommensurate), 势能的相对强度 b 成为控制参量。一般而言, 原子链处于基态时, 序号 j 的原子的位置 x_j 相对其平衡位置 $a_0j + x_B$ (x_B 为原子链质心的位移) 有较小的偏移 ξ_j 。

Aubry 等^[23, 24]引入壳函数 $g(x)$ 来描述 ξ_j 随格点位置的变化, 发现对处于基态的无公度结构, 相对强度 b 有 1 个临界点 b_c , 当 $b < b_c$ 时壳函数 $g(x)$ 是解析函数, 越过临界点后 $g(x)$ 不可解析, 即 $g(x)$ 由光滑连续函数变为由若干平台组成的非连续函数, 称为“解析性的破缺”或 Aubry 转变。如果 $g(x)$ 是解析函数, 加 1 个无限小的力, 原子就可以绝热地 (无耗散地) 运动起来, 静摩擦力为 0; 而解析性被打破后, 原子链被锁在周期势场中, 必须越过周期势场的势垒才能让处于基态的原子链运动起来, 而静摩擦力则为有限值。

Weiss 等^[21]对包括 2 种弹簧作用的一维 FKT 模型进行了分析和数值计算, 发现在静态和准静态滑动时, 相对强度 b 会有 3 个临界点: 第一个临界点就是 Aubry 转变点, 即解析性破缺的临界点, 其对应无公

度结构静摩擦力由 0 到有限值的改变, 当壳函数出现跳跃后, 原子微滑 (microslip) 导致的能量耗散使得静摩擦力不为 0; 第二个是壳函数由单值变为多值函数的临界点, 相应于准静态滑动时动摩擦力由 0 到有限值的变化, 由于越过临界点后系统出现多个定态, 壳函数在某些点成环状, 对应于由鞍点分叉形成的双稳间隔, 从某个状态开始准静态滑动后, 系统绝热变化, 直到遇到鞍点分叉, 于是系统重组 (reconfiguration) 到 1 个新的定态, 在重组中粒子必须运动一段有限的距离并消耗一定的能量, 所以动摩擦力不再为 0; 第三个是第一个定态变为稳定 (成为准稳态) 的临界点, 未到达时基态是唯一的稳定状态, 静摩擦力唯一, 越过后稳定态不再唯一, 从而使得静摩擦力和初始状态相关。

2.2 FK 类模型动态分析

动态分析时, 可按阻尼的大小分无阻尼^[25, 26]、过阻尼^[27, 28]和欠阻尼^[29, 30]分别进行研究。Hirano 等^[26, 31]研究了一维 FK 模型在无阻尼、无驱动和无公度时的动态特性, 其计算结果表明: 初速度在某个临界值之上会出现超滑 (superlubricity), 即动摩擦力为 0; 反之摩擦力大于 0, 这个临界值与表面作用强度相关。关于超滑的机理, 他们认为在这样一个保守系统中, 超滑是由于在较高速度时持续发生“复现” (recurrence) 现象, 平动能随滑动不断增大和减小, 而平均值保持不变, 从而摩擦力为 0, 实际上是质心和内部简正振动模之间发生了可逆的能量交换, 而高维的运动和无公度性将有利于超滑的出现。

在过阻尼情况下, 当时间足够长时运动方程中坐标的二次导数可以忽略。Middleton^[32]研究发现, 无论是公度或无公度的结构, 滑动状态都只有 1 个周期解, 类似于静态分析, 这个解可用动态壳函数来描述。此时, 每个粒子都以相同的周期运动, 只是相差一定的相角。

在欠阻尼时, 情况将会复杂得多, 且表现出丰富的动力学行为。除了周期解之外, 还存在准周期解和混沌解, 这取决于参数 b , γ 和速度 v ^[30, 33]。

周期性解仍可用动态壳函数来描述, 通过将壳函数线性化处理, 即傅利叶展开后计算求解。当阻尼常数 γ 较小 (即大惯性) 时, 某些特定速度处出现共振峰。在共振峰附近, 原子振动幅值和周期势场幅值在同一量级, 解不唯一, 导致双稳和迟滞。这种共振是由周期势场作用在耦合原子链上所致, 其分为主共振 (main resonance) 和超谐波共振 (superharmonic resonance)。当滑动速度远大于共振速度时, 所有粒

子都在平衡位置附近以小振幅振动, 周期势场的影响消失, 链中各原子间相互作用为 0, 称为固体滑动状态, 此时摩擦力正比于滑动速度. 当 v - F 曲线的斜率为负值时, 假设速度有正的小扰动, 正反馈的作用使原子链运动加速, 扰动被放大, 所以解不稳定, 斜率为正所对应的状态在 γ 减小或 b 增大时也可能变得不稳定, 此即参数共振 (parametric resonance). 参数共振在 γ 减小或 b 增大时会产生准周期解. 因在共振峰附近解的不唯一, 使得在无公度情况下, 系统会自组织为有不同滑动速度的区域 (domains). 随着 γ 继续减小和 b 不断增大, 准周期解也变得不稳定而导致混沌解, 又称为流体滑动状态, 此时粒子运动的幅值和晶格常数在同一量级, 特性类似于流体.

3 结束语

利用 Frenkel-Kontorova 和 D 等理论模型, 人们对摩擦中的动力学过程和能量耗散的机制获得了比较深入的理解. 其中 D 模型已经被用来解释摩擦中的一些基本现象, 而可以进行定量描述的 FK 模型在无磨损摩擦中的应用尚未展开. 这一方面是因为 FK 模型解的形态本身很复杂, 另一方面是因为没有充分认识到 FK 模型在定性和定量描述摩擦的微观机理中的重要作用. 在对摩擦机理的探索中, 理论模型不仅是目标, 也是研究的起点. 对于简单模型的理解将有助于对更大规模的甚至实际的系统的模拟计算和实验研究, 并可能由此而建立更完善和实际的模型.

参考文献:

[1] Bowden F P, Tabor D. Friction and Lubrication[M]. Oxford: Oxford University Press, 1954.

[2] Singer I L, Pollock H M. Fundamentals of friction: macroscopic and microscopic processes [C]. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1992.

[3] 胡元中, 王慧, 邹鲲, 等. 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[J]. 摩擦学学报, 2000, 20(4): 313-316.

[4] Tomlinson G A. A molecular theory of friction[J]. Phil Mag Series, 1929, 7: 905-939.

[5] McClelland G M. Friction at Weakly Interacting Interfaces [C]. In Adhesion and Friction (Grunze M, Kreuzer H J), Berlin: Springer Verlag, 1989. 1-16.

[6] McClelland G M, Glosli J N. Friction at the Atomic Scale [C]. in Fundamentals of friction. 1992. 405-422.

[7] Glosli J N, McClelland G M. Molecular dynamics study of sliding friction of ordered organic monolayers [J]. Phys Rev Lett, 1993, 70: 1960-1963.

[8] Tomanek D, Zhong W, Thomas H. Calculation of an atomically modulated friction force in atomic-force microscopy [J]. Europhys Lett, 1991, 15 (8): 887-892.

[9] Gyalgó T, Bammerlin M L R, Meyer E, *et al*. Mechanism of Atomic Friction [J]. Europhys Lett, 1995, 31: 269-274.

[10] Sasaki N, Kobayashi K, Tsukada M. Atomic-scale friction image of graphite in atomic-force microscopy [J]. Phys Rev B, 1996, 54 (3): 2138-2149.

[11] Helman J S, Baltensperger W, Holyst J A. Simple model for dry friction [J]. Phys Rev B, 1994, 49(6): 3831-3838.

[12] Frenkel Y I, Kontorova T. On the Theory of Plastic Deformation and Twinning [J]. Zh Eksp Teor Fiz, 1938, 8: 1340.

[13] Frank F C, van der Merwe J H. One-dimensional dislocations I. Static theory [J]. Proc R Soc A, 1949, 198: 205-225.

[14] Braun O M, Kivshar Y S. Nonlinear dynamics of the Frenkel-Kontorova model [J]. Phys Rep, 1998, 306: 1-108.

[15] Bak P. Commensurate phases, incommensurate phases and the devil's staircase [J]. Rep Progr Phys, 1982, 45: 587-629.

[16] Matsukawa H, Fukuyama H. Theoretical study of friction: One-dimensional clean surfaces [J]. Phys Rev B, 1994, 49: 17286-17292.

[17] Kawaguchi T, Matsukawa H. Dynamical frictional phenomena in an incommensurate two-chain model [J]. Phys Rev B, 1997, 56(21): 13932.

[18] Sokoloff J B. Theory of dynamical friction between idealized sliding surfaces [J]. Surface Science, 1984, 144: 267-272.

[19] Sokoloff J B. Theory of energy dissipation in sliding crystal surfaces [J]. Phys Rev B, 1990, 42(1): 760-765.

[20] van Erp T S, Fasolino A, Radulescu O, *et al*. Pinning and phonon localization in Frenkel-Kontorova models on quasiperiodic substrates [J]. Phys Rev B, 1999, 60: (9) 6522-6528.

[21] Weiss M, Elmer F J. Dry Friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson Model: Static Properties [J]. Phys Rev B, 1996, 53(11): 7539-7549.

[22] Weiss M, Elmer F J. Dry Friction in the Frenkel-Kontorova-Tomlinson Model: dynamical properties [J]. Z Phys B, 1997, 104: 55-69.

[23] Aubry S. The New Concept of Transitions by Breaking of Analyticity in a Crystallographic Model [C]. In Solitons and Condensed Matter Physics (Bishop A R, Schneider T). Berlin: Springer-Verlag, 1979, 264-290.

[24] Aubry S. Critical behaviour at the transition by breaking of analyticity in the discrete Frenkel-Kontorova model [J]. J Phys C, 1983, 16: 1593-1608.

[25] Peyrard M, Kruskal M D. Kink dynamics in the highly discrete Sine-Gordon system [J]. Physica D, 1984, 14D: 88-102.

[26] Shinjo K, Hirano M. Dynamics of Friction: Superlubric State [J]. Surface Science, 1993, 283: 473-478.

[27] Floria L M, Mazon J. Dissipative dynamics of the Frenkel-

- Kontorova model[J]. *Adv Phys*, 1996, 45: 505-598
- [28] Coppersmith S N, Fisher D S. Threshold behavior of a driven incommensurate harmonic chain[J]. *Phys Rev A*, 1988, 38 (12): 6338-6350
- [29] Braun O M, Dauxois T, Paliy M V, *et al*. Nonlinear mobility of the generalized Frenkel-Kontorova model[J]. *Phys Rev E*, 1997, 55: (3) 3598-3612
- [30] Strunz T, Eimer F J. On the sliding dynamics of the Frenkel-Kontorova Model[M]. in *Fundamentals of friction* 1996, 149-161
- [31] Hirano M, Shinjo K. Atomistic locking and friction[J]. *Phys Rev B*, 1990, 41: 11837-11851
- [32] Middleton A A. A asymptotic uniqueness of the sliding state for charge-density waves[J]. *Phys Rev Lett*, 1992, 68 (5): 670-673
- [33] Strunz T, Eimer F J. Driven Frenkel-Kontorova model I Uniform sliding states and dynamical domains of different particle densities II Chaotic sliding and nonequilibrium melting and freezing[J]. *Phys Rev E*, 1998, 58 (2): 1601-1620

Models of Wearless Friction at the Atomic Scale

ZHANG Tao, WANG Hui, HU Yuan-zhong

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

Abstract: In order to gain a fundamental understanding of friction, many efforts have been made on wearless interfacial friction between two clean and atomically flat surfaces. Two simple theoretical models are reviewed in this concern. Thus the nonlinear static and dynamical properties of Frenkel-Kontorova (FK) model presenting more complexities of wearless friction are discussed. In FK model, the static properties strongly depend on the commensurability of the lattice constants of the surfaces, and the kinetic properties are divided into periodic, quasi-periodic and chaotic solutions.

Key words: friction; model; independent oscillator model; Frenkel-Kontorova model