

УДК 539.219.3

© 1992

ДИСКРЕТНОЕ СОПРИКОСНОВЕНИЕ ТВЕРДЫХ ТЕЛ ПОД ДЕЙСТВИЕМ НОРМАЛЬНОЙ НАГРУЗКИ

В. В. Мещеряков

Рассмотрен механизм соприкосновения твердого тела с абсолютно жесткой опорой, состоящий из диффузионного разрушения ступеней поверхности тела и упругого взаимодействия атомов-кариатид опорой. Показано, что число кариатид определяется силовыми характеристиками упругого поля акакси, зависит от нагрузки и обуславливает состояние границ раздела вещества и величину трения покоя.

Задача Томлинсона [1] о числе атомов-кариатид, обеспечивающих соприкосновение твердых тел под действием силы тяжести или другой нормальной нагрузки, по-видимому, до сих пор не имеет физического решения. Об этом говорят последние публикации на эту тему [2].

Не останавливаясь подробно на связи этой задачи с проблемами трения и износа [3] или тепло [4]- и электропроводности [5], отметим лишь, что ее решение должно быть основой микроскопического подхода к данным проблемам. Однако прежде необходимо хотя бы в общих чертах утановить механизм соприкосновения тел и дать оценку числа кариатид.

Представим, что твердое тело, имеющее произвольный микрорельеф поверхности, приближено к плоскости статической абсолютно жесткой сплошной опоры до ее соприкосновения с одним из атомов. Воздействуя на твердое тело небольшой силой N , направленной перпендикулярно плоскости опоры, можно получить упругую деформацию выступа поверхности, которому принадлежит атом-кариатида. Если же сила N будет превосходить некоторое критическое значение f_{oz} , обусловленное характером межатомных связей, то атом совершит диффузионный переход. Иначе говоря, атом выдавится из первого атомного слоя, образующего опорную террасу кристалла.

Диффузионное разрушение первого атомного слоя террасы, а затем и последующих будет происходить до тех пор, пока число кариатид не станет равным

$$n = \frac{N}{f_{oz}}. \quad (1)$$

Таким образом, задача Томлинсона сводится к определению силы f_{oz} , обуславливающей динамику диффузионного переноса атома. Его движение будет иметь ускоренный характер под действием силы f , связанной уравнением $f(t) = md_1^2 \gamma(t)$ с траекторией атома $\gamma(t)$, которую примем одномерной и направленной вдоль оси x .

Задачу о единичном диффузионном перемещении атома можно сформулировать, рассматривая структуру деформаций s , генерируемых точечной силовой неоднородностью, движущейся с ускорением в сплошной среде [6]

$$\rho \partial_t^2 s_i(\mathbf{r}, t) = H_{ik, mn} \partial_m \partial_n s_k(\mathbf{r}, t) + f_i(t) \delta(\mathbf{r}) - P_{in}(t) \partial_n \delta(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где ρ — плотность среды, возмущение которой аппроксимирует отклик решетки на больших расстояниях от диффундирующего атома; $H_{ik, mn}$ — тензор Хуанга.

Неоднородность уравнения (2) определяется монопольным слагаемым с силой $f(t)$ и дипольным слагаемым с силовым тензором $P(t) = [f_0 + f(t)] [\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}(t)]$, в котором тензор статических силовых диполей $P^{(0)} = f_0 \mathbf{r}_0$ описывает упругое поле вакансии.

Ускоренное перемещение атома, сопровождаемое переносом упругого поля вакансии, определяет динамические параметры диффузии, и, следовательно, нормальная к границе раздела z -компонента силы f_0 задает критическую нагрузку, определяющую n .

1. Статическое упругое поле вакансии

Для вычисления f_0 рассмотрим статический предел уравнения (2)

$$H_{ik, mn} \partial_m \partial_n s_k(\mathbf{r}) = P_{in}^{(0)} \partial_n \delta(\mathbf{r}). \quad (3)$$

В приближении $H_{ik, mn} = c_{44} \delta_{ik} \delta_{mn}$ с одной упругой постоянной c_{44} , которым ограничимся для качественных оценок, решение уравнений (3) дает

$$s(\mathbf{r}) = \frac{f_0 (\mathbf{r}_0 \cdot \mathbf{r})}{4\pi c_{44} r^3}. \quad (4)$$

Поле деформаций (4) описывает центр сжатия или растяжения (в зависимости от знака f_0) на далеких расстояниях от вакансии.

Объемный эффект, обусловленный вакансией, вычисляется с помощью интеграла по сфере $\int s dS = \Omega$, который приводит к соотношению

$$f_0 \cdot \mathbf{r}_0 = 3c_{44} \Omega, \quad (5)$$

где Ω — атомный объем.

Следующее уравнение для f_0 можно найти из условия статического равновесия кристалла при диффузионном перемещении атома. Для этого необходимо иметь его кинематику. Определяя энергию самодиффузии как поглощенную, зададим начальную скорость атома $\mathbf{v}(0) = 0$. Учтем далее, что статическое равновесие кристалла на концах временного интервала, соответствующего полному пробегу атома, требует выбора осциллирующей функции для ускорения атома. Наконец, полагая, что при $t = 0$ атом находится в начале координат, и учитывая линейный пробег атома, определим его кинематику радиусом-вектором

$$\mathbf{r}(t) = \frac{\mathbf{f}_m}{m\omega^2} (\omega t - \sin \omega t), \quad (6)$$

где ω и \mathbf{f}_m — неопределенные динамические параметры.

Исключение вращательных степеней свободы достигается удовлетворением условию

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_0 \times \mathbf{r}(t) + \mathbf{f}(t) \times \mathbf{r}_0 &= 0, \\ \mathbf{f}_0 \times \mathbf{r}_0 &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

Дифференцируя (7) дважды по времени и используя (6), получим

$$f_0 = m\omega^2 r_0 \quad (8)$$

— условие отсутствия вращения кристалла при диффузионном перемещении атома.

Полагая, что упругое поле вакансии сферически-симметрично ($f_{0x} = f_{0y} = f_{0z}$, $x_0 = y_0 = z_0$), и учитывая соотношения (5) и (8), найдем

$$f_{0z}^2 = c_{44}\Omega m\omega^2, \quad z_0^2 = \frac{c_{44}\Omega}{m\omega^2}. \quad (9)$$

—откуда следует, что для решения задачи достаточно определить ω .

2. Поглощение упругой энергии при диффузионном перемещении атома

Частоту ω можно определить, используя закон сохранения энергии в динамике движения диффундирующего атома. Для этого необходимо решить уравнения (2) и вычислить энергию упругих волн решетки, идущую на ускоренный перенос атома.

Для решения уравнений (2) зададим движение атома вдоль отрицательного направления оси x и составим тензор

$$P = \begin{bmatrix} [f_{0x} + f_x(t)] [x_0 + x(t)] & [f_{0x} + f_x(t)] y_0 & [f_{0x} + f_x(t)] z_0 \\ f_{0y} [x_0 + x(t)] & f_{0y} y_0 & f_{0y} z_0 \\ f_{0z} [x_0 + x(t)] & f_{0z} y_0 & f_{0z} z_0 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

В приближении $\pi r' \ll c_t \tau \ll r$, где $c_t = (c_{44}/\rho)^{1/2}$ — скорость распространения деформаций и τ — время диффузионного пробега атома, например, для x -компоненты смещений запаздывающие интегралы имеют вид

$$\frac{1}{4\pi c_{44} r} \int dr' [f_x(t') - P_{xn}(t') \partial_n] \delta(r') + \\ + \frac{1}{4\pi c_{44} r} \int dr' \frac{\pi r'}{c_t} \frac{\partial}{\partial t'} [f_x(t') - P_{xn}(t') \partial_n] \delta(r').$$

Их вычисление приводит к полю смещений

$$s_i = \frac{1}{4\pi c_{44} r} \left(f_i + \frac{\dot{P}_{in} x_n}{c_t r} \right). \quad (11)$$

Плотность тока упругих деформаций $j_k = \sigma_{ki} \dot{s}_i$, где тензор напряжений $\sigma_{ik} = C_{ik, mn} \partial_m s_n$ определяется тензором плотности энергии

$$C_{ik, mn} = H_{im, kn} + H_{in, mk} - H_{ik, mn}. \quad (12)$$

Вычисляя $\partial_i s_n = \dot{s}_n x_i / c_t r$, $j_n = c_{44} \dot{s}_n^2 x_i^2 / c_t r$ и определяя интенсивность поглощения $I = \int j_n dS_n$, найдем

$$I = \frac{\dot{f}_i^2}{4\pi c_{44} c_t} + \frac{\dot{P}_{in}^2}{12\pi c_{44} c_t^2}. \quad (13)$$

Изменение кинетической энергии диффундирующего атома обусловлено первым слагаемым в (13). Вычисляя полную поглощенную энергию E за время $\tau = \pi/\omega$, получим $E = \omega f_m^2 / 8c_{44} c_t$. Сравнение этой величины с кинетической энергией атома $m v^2(\tau)/2$ дает частоту

$$\omega = \left(\frac{16c_{44} c_t}{m} \right)^{1/3}, \quad (14)$$

на которой происходит поглощение энергии в системе.

3. Число атомов-кариатид

Используя (14) и (9), найдем силу

$$f_{oz} = m c_t \omega = 16^{1/3} c_{44} \Omega^{2/3}, \quad (15)$$

подстановка которой в (1) определяет число кариатид

$$n = \frac{N}{16^{1/3} c_{44} \omega^{2/3}}. \quad (16)$$

Для твердого тела в форме куба с ребром l , соприкасающегося с абсолютно жесткой опорой под действием внешней силы Q и силы тяжести Mg , отношение n к числу атомов на грани куба n_l^2 равно

$$\frac{n}{n_l^2} = \frac{1}{16^{1/3} c_{44}} \left(\frac{Q}{l^2} + \rho g l \right), \quad (17)$$

где учтено, что $M = \rho l^3$ и $l^3 = n_l^3 \omega$.

Поскольку давление со стороны внешней силы $p_Q = Q/l^2$ убывает обратно пропорционально площади грани куба, а давление, обусловленное силой тяжести $p_g = \rho g l$, растет пропорционально длине ребра куба, то отношение n/n_l^2 имеет минимум при линейном размере

$$L_{\min} = \left(\frac{2Q}{\rho g} \right)^{1/3}, \quad (18)$$

соответствующем нагрузке $Q_{\min} = Mg/2$.

Подставляя (18) в (17), получим

$$\left(\frac{n}{n_l^2} \right)_{\min} = \frac{3(\rho g)^{2/3} Q_{\min}^{1/3}}{4c_{44}}. \quad (19)$$

Оценим эту величину для алюминиевого кристалла с параметрами $\rho = 2.7 \cdot 10^3$ кг/м³, $c_{44} = 2.8 \cdot 10^{10}$ Н/м² при $T = 300$ К и $\Omega = 1.7 \cdot 10^{-29}$ м³. Например, для $Q = 1$ Н и $Mg = 2$ Н отношение

$$\left(\frac{n}{n_i^2}\right)_{\min} = 2.4 \cdot 10^{-8}, \quad (20)$$

и поскольку $n_{i,\min}^2 = (M/\rho\Omega)^{2/3} = 2.7 \cdot 10^{16}$, то

$$n_{\min} = 6.5 \cdot 10^8. \quad (21)$$

Результаты (20) и (21) подтверждают гипотезу Томлинсона и говорят о том, что кубик Al размером $l_{\min} \approx 4.2 \cdot 10^2$ м, прижатый к опоре силами $Q = 1$ Н и $Mg = 2$ Н, соприкасается с ней лишь одним из каждых $4.2 \cdot 10^7$ атомов поверхности. Это объясняет, почему твердые тела с чистыми поверхностями при соприкосновениях под умеренной нагрузкой сохраняют свои индивидуальные физические свойства. Малая степень Q_{\min} в (19) приводит к незначительному росту n/n_i^2 . А при снятии внешней нагрузки ($Q = 0$ в (17)) отношение n/n_i^2 становится еще меньше, чем оценка (20), в полтора раза, что по сути не меняет качественного характера эффекта.

Посмотрим, какими должны быть параметры кристалла, чтобы все ступени его поверхности разрушились до основания. В этом случае, соответствующем соприкосновению всех атомов плоской грани кристалла с опорой ($n = n_i^2$), для $Q_{\min} = Mg/2$ из (19) следует, что

$$l_c = \frac{2 \cdot 16^{1/3} c_{44}}{3\rho g} = \frac{2 \cdot 16^{1/3} c_i^2}{3g} = 1.8 \cdot 10^6 \text{ м},$$

$$M_c = \rho l_c^3 = 1.5 \cdot 10^{22} \text{ кг},$$

$$Q_c = \frac{1}{(\rho g)^2} \left(\frac{4c_{44}}{3}\right)^3 = 7.4 \cdot 10^{22} \text{ Н}.$$

Космологический порядок найденных параметров дает основание предположить, что состояние границ раздела вещества с $n = n_i^2$ можно ожидать внутри планет с радиусом

$$R = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/3} l_c \approx \frac{c_i^2}{g} = \frac{\gamma M}{c_i^2},$$

где γ — гравитационная постоянная. Или же — для кристаллов в мегабарном диапазоне давлений, например для Al,

$$p = \frac{Q_c}{l_c^2} = \frac{16^{1/3} c_{44}}{3} = 2.3 \cdot 10^{10} \text{ па},$$

что следует из (17) при $g = 0$.

Наконец, рассмотрим случай $n \sim 1$. Для нагрузки силой тяжести, при которой кристалл будет соприкасаться с опорой не более чем в трех точках, из (16) для $Q = 0$ получим

$$M_1 = \frac{16^{1/3} c_{44} \Omega^{2/3}}{g} = 4.7 \cdot 10^{-10} \text{ кг},$$

$$l_1 = \left(\frac{M_1}{\rho} \right)^{1/3} = 5.6 \cdot 10^{-5} \text{ м}.$$

Этот мезоскопический порядок величин характеризует кластер с числом атомов

$$n_{l_1}^3 = \frac{l_1^3}{\Omega} = 10^{16}.$$

Если же исключить силу тяжести, положив $g=0$, то сила, допускающая упругое соприкосновение кристалла Al с опорой не более чем в одной точке, равна

$$Q_1 = f_{0z} = 4.7 \cdot 10^{-9} \text{ Н}$$

и характеризует силовое дипольное возмущение решетки единичной кристаллической вакансией алюминия в перпендикулярном к диффундирующему атому направлении.

4. Сила трения покоя

Определим силу трения покоя

$$F_f = n f_{mx} \quad (22)$$

как сумму амплитуд f_m , одновременно приложенных к n кариатидам и, следовательно, задающих их одновременное диффузионное смещение.

Для вычисления f_m воспользуемся тем, что перенос энергии в решетке осуществляется упругими волнами с плотностью кинетической энергии $\rho c_t^2/2$. Полагая $\rho = m/\Omega$, получим

$$\frac{m c_t^2}{2} = E, \quad (23)$$

где E — полная поглощенная энергия за время положительно ускоренного движения атома.

С другой стороны, эту энергию можно выразить через диффузионные параметры. Раскрывая (13) с помощью (10) и учитывая, что $f_0 = m\omega^2 r_0$, найдем

$$I = \frac{\dot{f}_x^2}{4\pi c_{44} c_t} + \frac{(\ddot{f}_x x + 2\dot{f}_x \dot{x} + f_x \dot{x}')^2}{12\pi c_{44} c_t^3} + \frac{(f_{0y}^2 + f_{0z}^2) \left(\frac{\dot{f}_x^2}{m^2 \omega^2} + \dot{x}'^2 \right)}{12\pi c_{44} c_t^3}. \quad (24)$$

Тогда полная поглощенная энергия за время $\tau = \pi/\omega$, когда атом приобретает максимальную скорость $v(\tau)$, равна

$$E = \frac{\omega f_m^2}{8c_{44}c_l^2} + \frac{\alpha f_m^4}{12c_{44}c_l^2 m^2 \omega} + \frac{f_0^2 f_m^2}{12c_{44}c_l^2 m^2 \omega}, \quad (25)$$

где $\alpha \approx 4.55$, $f_0 = f_{0y}^2 + f_{0z}^2$.

Первое слагаемое формулы (25) дает энергию, идущую на изменение кинетической энергии атома, второе — на изменение дипольного момента решетки, третье — на перенос упругого поля вакансии. Они соответствуют слагаемым формулы (24), а первое из них уже использовалось при получении формулы (14).

Особенность формул (24) и (25) состоит в том, что в них не вошла продольная движению компонента f_{0x} . Следовательно, продольные деформации переносятся без затраты работы. Энергия, связанная с переносом упругого поля вакансии, определяется только поперечными движению атома компонентами f_{0y} и f_{0z} , обуславливая объемный характер диффузии при разрушении ступеней поверхности на границе раздела.

В статике существует другая особенность. Если кариатида стоит на идеально ровной плоской опоре, то реакции вдоль оси y не существует: $f_{0y} = 0$. Если же поверхность опоры шероховатая, то помимо f_{0z} может включаться в нагрузку на кариатиду и компонента f_{0y} . Поэтому

$$f_0^2 = \begin{cases} f_{0z}^2 & \text{для плоской опоры,} \\ f_{0z}^2 + f_{0y}^2 & \text{для шероховатой опоры.} \end{cases}$$

Сравнивая (23) с (25), найдем уравнение для f_{mx}

$$f_{mx}^4 + \frac{1}{\alpha} \left[\frac{3}{2} (mc_l \omega)^2 + f_0^2 \right] f_{mx}^2 - \frac{3}{8\alpha} (mc_l \omega)^4 = 0. \quad (26)$$

Решение (26) дает

$$f_{mx} = kf_0, \quad (27)$$

где коэффициент трения

$$k = \begin{cases} 0.31 & \text{для } f_0^2 = f_{0z}^2, \\ 0.35 & \text{для } f_0^2 = f_{0y}^2 + f_{0z}^2. \end{cases}$$

Умножая (27) на число кариатид n и учитывая определение (22), получим

$$F_f = kN$$

— закон Амонтона.

Этот результат показывает, что пропорциональная связь силы трения покоя и нормальной нагрузки на твердое тело является следствием линейного упругого взаимодействия тела и опоры, которое возникает после диффузионного разрушения ступеней поверхности твердого тела. Энергия, идущая на перенос упругого поля вакансии, пропорциональна силе f_0^2 и, следовательно, в гармонической задаче на величину трения покоя не оказывает влияния, представлено ли вакансионное состояние центром сжатия или центром растяжения. Это объясняет причину того, что для чистых поверхностей металлов, полупроводников и диэлектриков, для которых можно ожидать различия в состояниях вакансии, экспериментальные значения k близки и находятся в пределах от 0.3 до 0.35.

Подставляя (27) и (14) в (6) и вычисляя значение максимальной скорости атома $v(\tau) = 2kc_t$, получим, что для изотропного гармонического кристалла с одной упругой постоянной коэффициент трения

$$k = \bar{v}/c_t,$$

где \bar{v} — средняя скорость диффундирующего атома.

Таким образом, при диффузионном перемещении атом ускоряется до значений $v(\tau) = 0.62 - 0.7c_t$.

Итак, сила трения покоя формируется двумя эффектами: диффузионным разрушением ступеней поверхности и упругим взаимодействием поверхностей твердых тел, обусловленным существованием статического упругого поля вакансии. В этой связи становится понятным, что анализ скольжения твердых тел можно связать с решением динамической задачи о силе f_0 , которая, однако, требует самостоятельного исследования.

Возвращаясь к статической задаче об атомах-кариатидах сделаем еще три замечания.

1. Использование приближения с одной упругой постоянной для тензора Хуанга, конечно, дает лишь грубые оценки величин. Однако, учитывая перекрытый диапазон масс исследуемых объектов от $m \sim 10^{-26}$ до $M \sim 10^{22}$, это приближение можно считать оправданным с точки зрения его способности отразить основные качественные особенности задачи.

2. Среди возможных исключений явно просматривается зависимость числа кариатид от температуры, вплоть до точки плавления. Приближение с одной упругой постоянной говорит лишь о том, что, поскольку c_{44} уменьшается с ростом температуры, число кариатид с приближением кристалла к точке плавления увеличивается. Подробный анализ этой зависимости даже при феноменологическом описании хода упругих постоянных от температуры требует более точного решения задачи.

3. Наконец, надо сказать, что допущение об абсолютной жесткости опоры ограничивает набор пар соприкосновения, выделяя пары с резко отличающимися прочностными характеристиками поверхностей. В промежуточном случае диффузионному разрушению будут подвергаться выступы поверхностей обоих соприкасающихся тел. Однако конечное статическое состояние пары, задающее число кариатид, и в этом случае будет полностью определяться свойствами более мягкой ее составляющей.

Список литературы

- [1] Tomlinson I. // Phil. Mag. 1929. V. 7. P. 905—939.
- [2] Zhong W., Tomanek D. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. N 25. P. 3054—3057; Den Nijs Marcel // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. N 4. P. 435—438; Motohisa Hirano, Kasumasa Shinjo // Phys. Rev. B. 1990. V. 41. N 17. P. 11837—11850.
- [3] Крагельский И. В., Добычин М. Н., Колбанов В. С. Основы расчетов на трение и износ. М., 1977. 526 с.
- [4] Шлык Ю. П., Ганин Е. А., Царевский С. И. Контактное термическое сопротивление. М., 1977. 328 с.
- [5] Хольм Р. Электрические контакты. М., 1961. 464 с.
- [6] Мещеряков В. В. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 8. С. 2470—2472.