

## Прерывистый режим плавления граничной смазки с учетом пространственной неоднородности

© Я.А. Ляшенко

Сумский государственный университет,  
40007 Сумы, Украина  
e-mail: nabla04@ukr.net

(Поступило в Редакцию 27 сентября 2013 г.)

В рамках модели фазовых переходов первого рода, с учетом пространственной неоднородности, изучаются процессы граничного трения двух атомарно-гладких твердых поверхностей, при наличии ультратонкого слоя смазочного материала между ними. Рассмотрен прерывистый (stick-slip) режим движения, часто наблюдаемый для таких систем экспериментально. Такой режим представлен как периодические фазовые переходы первого рода между структурными состояниями смазочного материала. Показано, что в процессе движения смазка стремится принять однородную по плоскости скольжения структуру, что приводит к периодичности зависимостей основных параметров от времени в прерывистом режиме. Проанализирована зависимость параметра порядка от скорости сдвига и показано, что для всех областей по плоскости контакта эта зависимость имеет один и тот же вид.

### Введение

В последние годы многократно увеличился интерес к изучению процессов граничного трения. Указанный режим возникает, если смазочный материал или отсутствует вовсе, или имеет толщину в несколько атомарных диаметров. Согласно диаграмме Герси–Штрибека, в граничном режиме реализуется больший коэффициент трения, чем в жидкостном, что приводит к быстрому износу трущихся деталей в наномеханизмах. С другой стороны, экспериментально показано, что при ультратонкой толщине смазочного материала возможен режим, в котором сила трения настолько мала, что трущиеся поверхности нельзя длительное время удерживать друг на друге, поскольку верхняя соскальзывает с нижней даже без внешнего воздействия. Эта ситуация подобна неустойчивому равновесию системы, когда потенциальная энергия принимает максимальное значение. В граничном режиме реализуется еще ряд интересных эффектов — эффекты памяти, твердоподобные и жидкоподобные кинетические режимы, не являющиеся устойчивыми термодинамическими фазами, прерывистый режим движения, нетривиальная зависимость характеристик трения от приложенного внешнего давления и т.п. Поэтому исследование режима граничного трения имеет высокое фундаментальное и прикладное значение. Современное оборудование позволяет проводить прямые наблюдения за процессами, происходящими в области контакта [1–3]. В граничном режиме зачастую нарушается хорошо известный закон Амонтона. Например, в экспериментах по изучению трения плоских твердых поверхностей, разделенных граничным слоем ароматических соединений [4], коэффициент статического трения с ростом нагрузки уменьшается, что связывается с уменьшением количе-

ства монослоев смазочного материала с увеличением нагрузки.

Для описания процессов граничного трения на сегодняшний день построено большое количество феноменологических моделей [5–7]. Так, в работах В.Л. Попова [6,7] разработана термодинамическая теория, основанная на теории фазовых переходов Ландау второго рода [8]. Однако в режиме граничного трения часто наблюдаются скачкообразные фазовые превращения первого рода [2,9], приводящие к установлению прерывистого режима движения [2,9]. В работах [10–15] проводится обобщение термодинамической теории, предложенной в [6,7] на случай реализации фазового перехода первого рода, который приводит к прерывистому характеру движения. Причем в работе [10] проводится непосредственно указанное обобщение, а также исследование прерывистого режима движения и причин, приводящих к нему. В [11] изучается влияние внешнего периодического воздействия. Работа [12] посвящена исследованию системы при учете универсальной зависимости эффективной вязкости от температуры и градиента скорости, полученной в результате молекулярно-динамического моделирования [16], а в [13] проведено исследование трения поверхностей, обладающих наноразмерными неровностями. Однако в [10–15] исследуется случай трения поверхностей без учета пространственной неоднородности. Предлагаемое исследование является логическим продолжением указанных работ и предпринято с целью теоретического изучения особенностей режима граничной смазки в пространственно неоднородной системе. Поскольку в технических приложениях поверхности трения всегда обладают неоднородностями, предлагаемый подход позволяет расширить результаты предыдущих исследований.

## 1. Свободная энергия

В рамках модели фазового перехода первого рода с учетом пространственной неоднородности выражение для плотности свободной энергии смазки, зажатой между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями, запишется в виде [6,7,10,11]:

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

где  $T$  — температура смазки,  $T_c$  — критическая температура,  $\varepsilon_{el}$  — сдвиговая упругая деформация,  $\alpha, a, b, c$  — положительные постоянные. В выражении (1) введен параметр порядка  $\varphi$ , представляющий амплитуду периодической части микроскопической функции плотности среды [6,7]. В жидкоподобной фазе устанавливается стационарное значение  $\varphi_0 = 0$ , в твердоподобной  $\varphi_0 \neq 0$ .

В однородном случае ( $\nabla \equiv 0$ ) потенциал (1) обладает экстремумами, определяемыми выражением [10,11]:

$$\varphi_{\mp} = \frac{b}{2c} \mp \sqrt{\left(\frac{b}{2c}\right)^2 - \left(\frac{a}{c}\varepsilon_{el}^2 + \frac{2\alpha(T - T_c)}{c}\right)}, \quad (2)$$

где  $\varphi_-$  отвечает максимуму потенциала (1), а  $\varphi_+$  — минимуму. Значения  $\varphi_+$  соответствуют стационарным состояниям смазки. Дополнительно к условию (2) всегда существует стационарное решение  $\varphi_0 = 0$ , отвечающее экстремуму потенциала при нулевом значении параметра порядка. Таким образом, плавление равноправно достигается двумя механизмами: обычное термодинамическое плавление при повышении температуры  $T$  и „плавление сдвигом“ за счет механического воздействия с увеличением упругой деформации  $\varepsilon_{el}$ .

Анализ выражения (1) позволяет выделить температуры плавления  $T_{c0}$  и затвердевания  $T_c^0$  смазки [10,11]

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha}\varepsilon_{el}^2 + \frac{b^2}{8\alpha c}, \quad (3)$$

$$T_c^0 = T_c - \frac{a}{2\alpha}\varepsilon_{el}^2. \quad (4)$$

Согласно выражениям (3), (4), плавление наступает также и в случае, когда упругая деформация  $\varepsilon_{el}$  превышает критическое значение

$$\varepsilon_{el,c0} = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a} + \frac{b^2}{4\alpha c}}, \quad (5)$$

а затвердевает смазка, когда деформация становится меньше величины

$$\varepsilon_{el,c}^0 = \sqrt{\frac{2\alpha(T_c - T)}{a}}. \quad (6)$$

## 2. Разностная схема, начальные и граничные условия

Для исследования кинетики процесса плавления запишем уравнение Ландау–Халатникова [10,17]:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\delta \frac{\partial f}{\partial\varphi}, \quad (7)$$

где введен кинетический коэффициент  $\delta$ . Будем полагать, что за счет тонкости смазочного слоя и фиксированного расстояния между поверхностями трения по толщине смазки можно считать однородной. В этом случае уравнение (7) запишется в явном виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\varphi}{\partial t} = & -\delta (2\alpha(T - T_c)\varphi + a\varphi\varepsilon_{el}^2 - b\varphi^2 + c\varphi^3) \\ & + g\delta \left( \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} \right) + \xi(t), \end{aligned} \quad (8)$$

где  $x$  и  $y$  — координаты по плоскости смазки. В (8) дополнительно введено стохастическое слагаемое  $\xi(t)$ , представляющее малые аддитивные флуктуации, учет которых необходим из-за особенностей дальнейшего численного счета [10,11]. Уравнение (8) является двумерным дифференциальным уравнением в частных производных параболического типа. Процедура численного решения такого типа уравнений хорошо известна. Приведем краткое описание ее основных этапов.

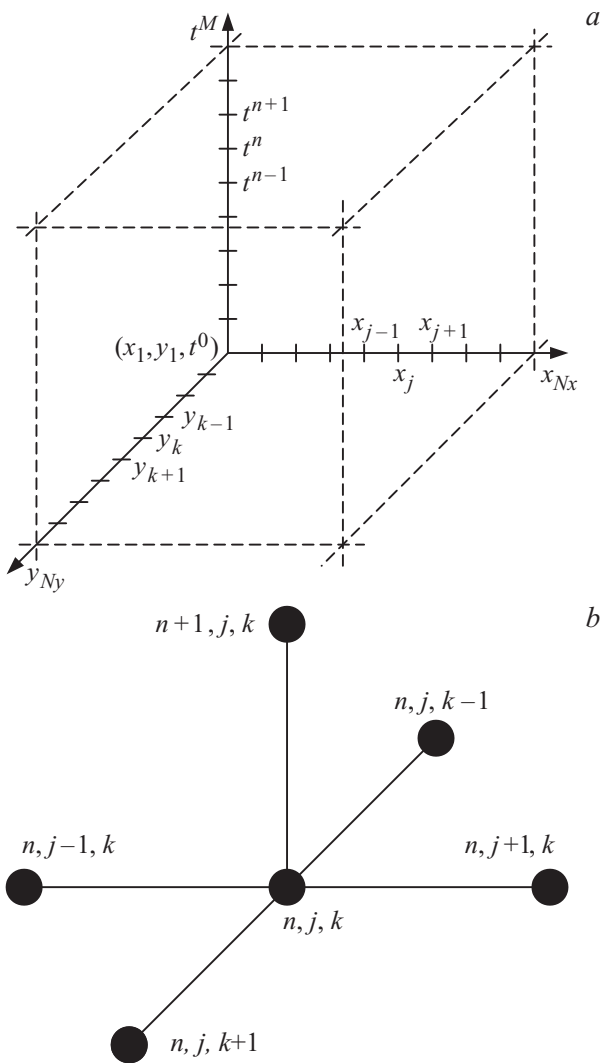
Сначала разобьем пространственные координатные оси  $x$  и  $y$ , а также ось времени  $t$  на определенное количество равных отрезков. При этом решение задачи на всей пространственно-временной области сводится к определению значений узлов трехмерной разностной сетки (см. рис. 1, а). Пускай  $n$  — порядковый номер точки деления по оси  $t$ ,  $j$  — по оси  $x$  и  $k$  — по оси  $y$ . При этом эти порядковые номера принимают следующие значения:

$$\begin{aligned} n &= 0, 1, 2, \dots, M, \\ j &= 1, 2, 3, \dots, N_x, \\ k &= 1, 2, 3, \dots, N_y. \end{aligned} \quad (9)$$

Согласно (9), значения переменных  $x$ ,  $y$  и  $t$  в произвольной точке пространственно-временной сетки будут определяться как

$$\begin{aligned} t^n &= n\Delta t, \\ x_j &= (j - 1)H_x, \\ y_k &= (k - 1)H_y, \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\Delta t$  — интервал разбиения по времени, а  $H_x$  и  $H_y$  — интервалы разбиения по координатам  $x$  и  $y$  соответственно. Для решения уравнения (8) будем использовать явную разностную схему. При этом производные,



**Рис. 1.** *a* — трехмерная разностная сетка для решения уравнения (14) [(17)]; *b* — разностный шаблон, характеризующий явную разностную схему (соотношения (11)–(13)).

входящие в уравнение, аппроксимируются следующим образом (рис. 1, *b*):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi_{j,k}^{n+1} - \varphi_{j,k}^n}{\Delta t}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{\varphi_{j+1,k}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j-1,k}^n}{H_x^2}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{\varphi_{j,k+1}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n}{H_y^2}. \quad (13)$$

При подстановке последних выражений в уравнение (8) получим явную разностную схему. Согласно разностному шаблону (рис. 1, *b*), при наличии начальных и граничных условий (см. ниже) такая схема имеет единственную неизвестную величину  $\varphi_{j,k}^{n+1}$ . Выражая эту

величину из разностной схемы представления уравнения (8), получим

$$\begin{aligned} \varphi_{j,k}^{n+1} = & \varphi_{j,k}^n + \frac{g\delta\Delta t}{H_x^2} (\varphi_{j+1,k}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j-1,k}^n) \\ & + \frac{g\delta\Delta t}{H_y^2} (\varphi_{j,k+1}^n - 2\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n) \\ & - \delta\Delta t \left( 2\alpha(T - T_c)\varphi_{j,k}^n + a\varphi_{j,k}^n \varepsilon_{el}^2 - b(\varphi_{j,k}^n)^2 \right. \\ & \left. + c(\varphi_{j,k}^n)^3 \right) + \sqrt{\Delta t} W_{j,k}^n. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь введена функция Бокса–Мюллера, адекватно описывающая стохастический источник  $\xi(t)$  [18]:

$$W_{i,j}^n = \sqrt{2D} \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_i \in (0, 1], \quad (15)$$

где  $r_1, r_2$  — псевдослучайные числа с равномерным распределением. В ранних работах [10,11] показано, что при взаимном перемещении поверхностей трения в слое смазочного материала возникают упругие деформации  $\varepsilon_{el}$ , которые можно выразить через толщину смазки  $h$  и относительную скорость сдвига трущихся поверхностей  $V$ :

$$\varepsilon_{el} = \frac{V\tau_\varepsilon}{h}, \quad (16)$$

где  $\tau_\varepsilon$  — максвелловское время релаксации внутренних напряжений [6]. Далее рассмотрим ситуацию, когда  $H_x = H_y = H$ . При этом, учитывая (16), уравнение (14) можно записать в более удобном для решения виде

$$\begin{aligned} \varphi_{j,k}^{n+1} = & \varphi_{j,k}^n \\ & + \frac{g\delta\Delta t}{H^2} (\varphi_{j+1,k}^n + \varphi_{j,k+1}^n - 4\varphi_{j,k}^n + \varphi_{j,k-1}^n + \varphi_{j-1,k}^n) \\ & - \delta\Delta t \left( 2\alpha(T - T_c)\varphi_{j,k}^n + a\varphi_{j,k}^n \left( \frac{V\tau_\varepsilon}{h} \right)^2 \right. \\ & \left. - b(\varphi_{j,k}^n)^2 + c(\varphi_{j,k}^n)^3 \right) + \sqrt{\Delta t} W_{j,k}^n. \end{aligned} \quad (17)$$

Для численного решения уравнения (17) его необходимо дополнить начальными и граничными условиями, которые представляются в виде

$$\varphi_{j,k}^0 = \xi(x_j, y_k), \quad (18)$$

$$\varphi_{1,k}^{n+1} = f_1(t^{n+1}, y_k), \quad (19)$$

$$\varphi_{N_x,k}^{n+1} = f_2(t^{n+1}, y_k), \quad (20)$$

$$\varphi_{j,1}^{n+1} = \phi_1(t^{n+1}, x_j), \quad (21)$$

$$\varphi_{j,N_y}^{n+1} = \phi_2(t^{n+1}, x_j), \quad (22)$$

где первое условие (18) представляет начальные условия на нулевом временном слое (рис. 1, *a*), а остальные 4 условия (19)–(22) описывают значения переменной  $\varphi$

на границах рассматриваемой системы (рис. 1). Условия (18)–(22) выбираются из физического представления задачи.

Для адекватного выбора начальных и граничных условий рассмотрим аналог SFA (surface force apparatus) [3]. Указанный аппарат широко используется для экспериментального исследования трения атомарно-гладких поверхностей, разделенных ультратонкой пленкой смазочного материала при различных толщинах смазочного слоя, нагрузках на систему, и т.д. В эксперименте трущиеся поверхности погружены в жидкость, которая представляет смазку. При этом смазочный материал при взаимном передвижении поверхностей не выдавливается из-под них даже при больших трибологических давлениях, которые обычно нужны для того, чтобы сблизить поверхности на расстояние, сравнимое с атомарными размерами, что и обеспечивает ультратонкость смазки (толщина всего в несколько атомарных диаметров, иногда исследуются и мономолекулярные слои). Поскольку свойства смазки, находящейся между поверхностями, сильно отличаются от свойств объемной жидкости, будем считать, что на границах системы смазочный материал свои свойства теряет не резко. Это позволяет для численного решения системы уравнений (17) применить периодические граничные условия, что эквивалентно „заворачиванию“ в тор пространственной плоскости, показанной на рис. 1, *a*. Такой подход позволяет, используя сравнительно небольшое количество разбиений по обоим осям, рассматривать бесконечные системы, в которых отсутствуют краевые эффекты. При этом в соотношениях (17) достаточно учесть 4 условия: если  $j = 1$ , то  $j - 1 \rightarrow N_x$ , если  $k = 1$ , то  $k - 1 \rightarrow N_y$ , если  $j = N_x$ , то  $j + 1 \rightarrow 1$ , если  $k = N_y$ , то  $k + 1 \rightarrow 1$ . При этом необходимость в использовании условий (19)–(22) отпадает. Начальные условия мы можем выбрать произвольным образом. Пускай значения узлов пространственной сетки на нулевом временном слое  $\varphi_{j,k}^0 \in [0, 1]$  и выбраны случайным образом с равномерным распределением.

### 3. Трибологическая система

Выражение (17) вместе с набором начальных и граничных условий (18)–(22) дает  $(M + 1)N_xN_y$  уравнений<sup>1</sup>, что как раз равно количеству узлов пространственно-временной решетки, показанной на рис. 1, *a*.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> В случае использования периодических граничных условий соотношения (19)–(22) заменяются таким же количеством уравнений (17) при  $j = 1, j = N_x, k = 1, k = N_y$ .

<sup>2</sup> При подсчете количества независимых уравнений следует учитывать, что  $f_1(t^{n+1}, y_1) = \phi_1(t^{n+1}, x_1)$ ,  $f_1(t^{n+1}, y_{N_y}) = \phi_2(t^{n+1}, x_1)$ ,  $f_2(t^{n+1}, y_1) = \phi_1(t^{n+1}, x_{N_x})$ ,  $f_2(t^{n+1}, y_{N_y}) = \phi_2(t^{n+1}, x_{N_x})$ . Для соответствующих функций это видно из левых частей уравнений (19)–(22), а также непосредственно из рис. 1, *a*, так как указанные значения лежат на вертикальных ребрах куба, являющихся общими для стыков вертикальных граней, на которых и выбираются граничные условия.

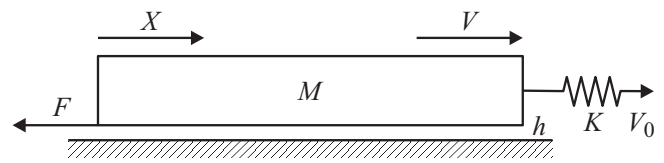


Рис. 2. Механический аналог простой трибологической системы, обладающей упругостью.

Однако в уравнение (17) входит также значение скорости сдвига  $V$ , которая в процессе движения обычно не является постоянной величиной. В связи с этим для конкретизации рассмотрим механический аналог трибологической системы, представленный на рис. 2. Система, приведенная на рис. 2, состоит из пружины с жесткостью  $K$ , блока массой  $M$ , который скользит по поверхности, отделенной от него слоем смазочного материала толщиной  $h$ . Свободный конец пружины приводится в движение с фиксированной скоростью  $V_0$ . При скольжении блока по поверхности между ними возникает сила трения  $F$ , определяемая формулой [10,11]

$$F = \left[ a\varphi^2 \varepsilon_{el} + k \operatorname{sgn}(V) \left( \frac{|V|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (23)$$

где  $A$  — площадь контакта трущихся поверхностей,  $k$  — феноменологический коэффициент, задающий зависимость вязкости смазочного материала от градиента скорости сдвига. В формуле (23) первое слагаемое в скобках представляет упругие напряжения, второе — вязкие [10,11]. Поскольку в нашем случае поверхности разбиваются пространственной сеткой, которая содержит  $N_x$  узлов по оси  $x$  и  $N_y$  — по оси  $y$ , формула (23) для  $n$ -го временного слоя с учетом (16) запишется в виде

$$F = \frac{AV}{N_x N_y h} \sum_{j=1}^{N_x} \sum_{k=1}^{N_y} \left[ a(\varphi_{j,k}^n)^2 \tau_e + k \operatorname{sgn}(V) \left( \frac{|V|}{h} \right)^{\gamma} \right]. \quad (24)$$

В (24) производится суммирование составляющих силы трения от каждой элементарной площадкой площадью  $A/(N_x N_y)$  (общее количество таких участков равно  $N_x N_y$ ), в центре каждой из которых располагается узел пространственной решетки, показанной на рис. 2, *a*.

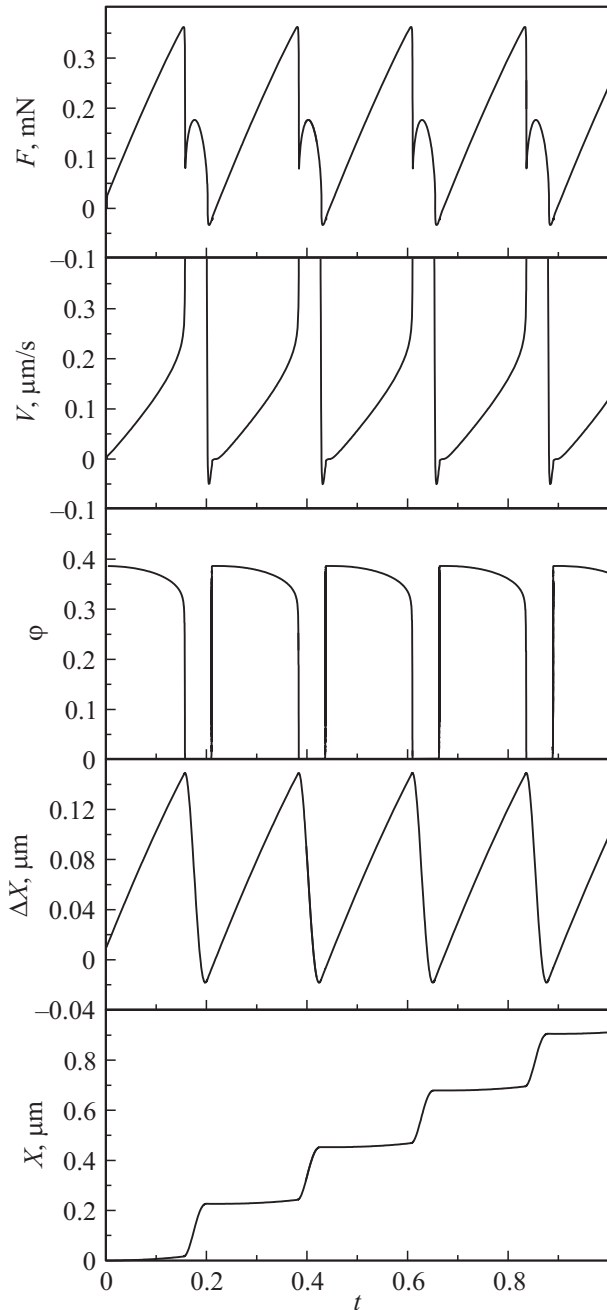
Координата верхней трущейся поверхности  $X$  может быть рассчитана согласно уравнению движения вида [2,6,10]

$$M\ddot{X} = K(V_0 t - X) - F, \quad (25)$$

где выражение в скобках представляет растяжение пружины  $\Delta X$ , а  $t$  — время движения ее свободного конца. Теперь у нас есть все необходимые для решения условия и уравнения, и система (17), (25) может быть решена численно.

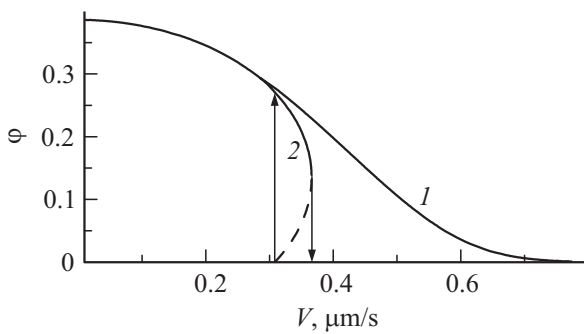
### 4. Результаты моделирования и обсуждение

Результат численной реализации процедуры (15), (17), (18), (24) и (25) с учетом соотношения  $\dot{X} = V$  приведен на рис. 3. На рисунке показаны временные зависимости



**Рис. 3.** Зависимости силы трения  $F$ , скорости блока  $V$ , параметра порядка  $\phi$ , натяжения пружины  $\Delta X$  и координаты блока  $X$  от времени  $t$  при параметрах  $N_x = N_y = 150$ ,  $dt = 10^{-7}$  ( $10^{-8}$ ) s,  $D = 10^{-30} \text{ s}^{-1}$ ,  $g/H^2 = 10$  ( $10^4$ ) J/m<sup>3</sup>,  $\alpha = 0.95 \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}/\text{m}^3$ ,  $T_c = 290 \text{ K}$ ,  $a = 4 \cdot 10^{12} \text{ Pa}$ ,  $b = 230 \text{ J}/\text{m}^3$ ,  $c = 850 \text{ J}/\text{m}^3$ ,  $h = 10^{-9} \text{ m}$ ,  $\tau_c = 10^{-8} \text{ s}$ ,  $A = 0.3 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2$ ,  $k = 3 \cdot 10^4 \text{ Pa} \cdot \text{s}^{1/3}$ ,  $\gamma = -2/3$ ,  $\delta = 100 \text{ J}^{-1} \cdot \text{m}^3/\text{s}$ ,  $K = 2500 \text{ N}/\text{m}$ ,  $M = 0.4 \text{ kg}$ ,  $T = 270 \text{ K}$ ,  $V_0 = 1000 \text{ nm}/\text{s}$ .

силы трения  $F$ , скорости блока  $V$ , параметра порядка  $\phi$ , натяжения пружины  $\Delta X$  и координаты блока  $X$  при фиксированных параметрах модели (см. подпись к рисунку). Рисунок построен при параметрах, при которых в системе устанавливается прерывистый режим движения, когда смазка периодически плавится и затвердевает, а сила трения  $F$  имеет пилообразную зависимость от времени  $t$  [2]. Механизм возникновения прерывистого режима в рассматриваемом случае аналогичен механизму, подробно описанному в работе [10], где исследуется однородный случай без учета соответствующих градиентных вкладов. Несмотря на то что в настоящей работе проводится учет пространственной неоднородности, из рисунка видно, что устанавливающийся режим представляет периодический режим прерывистого трения. При выбранных параметрах после плавления смазки (скачкообразное уменьшение силы трения  $F$  и одновременное резкое увеличение величины сдвиговой скорости  $V$ ) и последующего снижения скорости за счет проскальзывания трущегося блока на существенное расстояние пружина сжимается ( $\Delta X < 0$ ), после чего трущийся блок некоторое время движется в противоположном направлении ( $V < 0$ ). Такой тип движения называется реверсивным и часто наблюдается в экспериментах по исследованию режима граничного трения. Из зависимости  $\phi(t)$  видно, что когда смазка расплавлена ( $\phi \approx 0$ ), скорость движения блока существенно увеличивается, за счет чего он за малый промежуток времени проскальзывает на существенное расстояние (см. зависимость  $X(t)$ ). Отметим, что при численном решении системы уравнений параметр  $\phi$  определяется отдельно для каждой из  $N_x \times N_y = 150 \times 150 = 22\,500$  элементарных площадок. Программно рассматривается двумерный массив, содержащий такое же количество элементов — значений  $\phi_{j,k}$ , которые постоянно пересчитываются согласно приведенной ранее итерационной процедуре. В связи с этим на рисунке  $\phi(t)$  приведена временная зависимость параметра порядка, который для каждого момента времени представляет случайным образом выбранный элемент массива (всего 22 500 элементов). Зависимость  $\phi(t)$  визуально является гладкой и непрерывной, что свидетельствует о том, что все элементы массива принимают одинаковые значения. Однако начальные условия выбирались случайным образом (см. последнее предложение второго раздела). Из этого следует, что смазочный слой после быстрой релаксации приобретает однородную структуру (характеризуется одинаковыми значениями  $\phi$  по плоскости временного слоя). Причем релаксация к однородному состоянию при выбранных начальных условиях осуществляется настолько быстро, что режим движения стационарен уже при малых начальных временах (зависимости на рис. 3 являются периодическими, без видимого переходного режима). Когда же параметр  $\phi_{j,k}$  во всех точках пространственной сетки принимает одинаковые значения, градиентный вклад нивелируется (см. выражение в скобках при  $g\delta\Delta t/H^2$  в расчетной формуле (17)). Отметим, что



**Рис. 4.** Зависимость значения параметра порядка  $\varphi$  (безразмерная величина) от скорости сдвига  $V$ . Кривая 2 получена по формуле (2), кривая 1 соответствует рис. 3.

уравнения решались при различных значениях отношения  $g/H^2$  (от 10 до  $10^4 \text{ J/m}^3$ ). При этом расчеты показали, что получаемые зависимости при различных  $g/H^2$  из указанного диапазона в точности повторяют приведенные на рис. 3. Причем при выборе значения  $g/H^2$  следует правильным образом выбирать шаг интегрирования по времени  $dt$ . Это связано с тем, что используемая для решения уравнений явная разностная схема (17) является условно устойчивой и требует уменьшения шага интегрирования  $dt$  при увеличении параметра  $g/H^2$ . Например, в случае, если уравнения (17) не содержат вторую скобку при  $\delta\Delta t$  (обычное уравнение теплопроводности), условие устойчивости итерационной процедуры запишется как

$$\Delta t \leq \frac{H^2}{4g\delta}, \quad (26)$$

что при  $g/H^2 = 10 \text{ J/m}^3$  дает условие  $dt \leq 2.5 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ , а при  $g/H^2 = 10^4 \text{ J/m}^3$  приводит к значению  $dt \leq 2.5 \cdot 10^{-7} \text{ s}$ . Поэтому, как это следует из подписи к рис. 3, для численного решения уравнений в зависимости от параметров выбиралось два значения  $dt$  (либо  $10^{-7} \text{ s}$ , либо  $10^{-8} \text{ s}$ ).

На рис. 3 в том числе приведена и зависимость значения параметра порядка  $\varphi$  от времени  $t$ . Из нее видно, что плавление и затвердевание происходят резко, по механизму фазового перехода первого рода. На рис. 4 дополнительно показаны зависимости величины  $\varphi$  от скорости сдвига  $V$ . Причем кривая 2 здесь соответствует выражению (2). На указанной зависимости реализуется гистерезис, т.е. смазка плавится и затвердевает при различных значениях скорости сдвига. Таким образом, выбранный вид потенциала (1) соответствует реализации в системе фазового перехода первого рода. Кривая 1 соответствует рис. 3. То есть эта кривая состоит из точек, и на ней приведены все значения  $\varphi$ , показанные на рис. 3, для всех циклов плавления/затвердевание. Поскольку кривая является гладкой, это еще раз подтверждает периодичность зависимостей, приведенных на рис. 3. Кривые 1 и 2 на рис. 4 совпадают только при

малых скоростях сдвига  $V$ . Это связано с тем, что хотя кривая 2 и показывает резкое уменьшение параметра  $\varphi$  до нуля при плавлении, в действительности этого не происходит, поскольку после удовлетворения условий плавления ((3) или (5)) происходит процесс непрерывной релаксации параметра  $\varphi$  к нулевому значению, а за это время за счет снижения силы трения трущийся блок успевает разогнаться до существенных скоростей  $V$ . Из зависимостей  $V(t)$  и  $\varphi(t)$ , приведенных на рис. 3, следует, что параметр  $\varphi$  после плавления принимает ненулевое значение, показанное на рис. 4, при больших скоростях сдвига  $V$  (приблизительно  $V > 0.3 \text{ } \mu\text{m/s}$ ) довольно малый промежуток времени, что говорит о быстром процессе релаксации. Однако варьированием кинетического коэффициента  $\delta$  можно описать и обратную ситуацию, когда релаксация параметра порядка к стационарному значению происходит медленно, что влияет на поведение системы критическим образом. Это один из возможных путей описания так называемых „эффектов памяти“, которые наблюдаются в рассматриваемых системах [2,19].

## Заключение

В работе проводится дальнейшее развитие теоретической модели граничного трения, предложенной В.Л. Поповым и основанной на теории фазовых переходов Ландау. Прерывистый режим движения в данной модификации модели представлен как периодические фазовые переходы первого рода между кинетическими режимами трения. Проведен учет пространственной неоднородности параметра порядка, для чего численно решается система уравнений в частных производных, используя явную разностную схему представления дифференциальных операторов. Показано, что в указанном случае смазка быстро релаксирует к однородному состоянию, в котором параметр порядка принимает по плоскости контакта одинаковые значения. Зависимость силы трения от времени близка к строго периодической, что подтверждают многочисленные эксперименты. Результаты работы обобщают полученные ранее результаты в рамках той же модели, где неоднородность смазки по пространству не учитывалась.

Работа выполнена при поддержке Государственного фонда фундаментальных исследований Украины в рамках гранта Президента Украины GP/F49/044 „Термодинамическая теория проскальзывания по границам зерен в проблеме сверхпластичности наноструктурированных металлов“ (номер госрегистрации 0113U007248). 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] *Yoshizawa H., Israelachvili J.* // J. Phys. Chem. 1993. Vol. 97. N 43. P. 11 300–11 313.
- [3] *Israelachvili J.* // Surf. Sci. Rep. 1992. Vol. 14. N 3. P. 109–159.
- [4] *Hardy W., Bircumshaw J.* // Proc. R. Soc. Lond. A. 1925. Vol. 108. P. 1–27.
- [5] *Filippov A.E., Klafter J., Urbakh M.* // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 92. N 13. P. 135 503–4.
- [6] *Попов В.Л.* // ЖТФ. 2001. Т. 71. Вып. 5. С. 100–110.
- [7] *Ропов V.L.* // Sol. St. Commun. 2000. Vol. 115. N 7. P. 369–373.
- [8] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1995. 605 с.
- [9] *Berman A.D., Ducker W.A., Israelachvili J.N.* // Langmuir. 1996. Vol. 12. N 19. P. 4559–4563.
- [10] *Ляшенко Я.А.* // ЖТФ. 2012. Т. 82. Вып. 1. С. 19–28.
- [11] *Ляшенко Я.А.* // ЖТФ. 2011. Т. 81. Вып. 6. С. 125–132.
- [12] *Ляшенко Я.А.* // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 7. С. 87–95.
- [13] *Ляшенко Я.А., Винниченко И.В.* // ЖТФ. 2013. Т. 83. Вып. 9. С. 90–97.
- [14] *Lyashenko I.A., Zaskoka A.M.* // Ukr. J. Phys. 2013. V. 58. N 1. P. 91-102.
- [15] *Lyashenko I.A., Zaskoka A.M.* // J. Phys. Stud. 2013. V. 17. N 1. P. 1002 (7).
- [16] *Sivebaek I.M., Samoilov V.N., Persson B.N.J.* // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. P. 036 102–4.
- [17] *Ландау Л.Д., Халатников И.М.* // ДАН СССР. 1954. Т. 96. № 3. С. 469–472.
- [18] *Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P.* Numerical Recipes in C: the Art of Scientific Computing. NY: Cambridge University Press, 1992. 1020 p.
- [19] *Погребняк А.Д., Братушка С.Н., Береснев В.М., Levintant-Zayonts N.* // Успехи химии. 2013. Т. 82. Вып. 12. С. 1135–1159.