

05 Нелинейная модель наноконтактного трения в атомно-силовой микроскопии

© С.Ш. Рехвиашвили

Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН, Нальчик, Россия
E-mail: rsergo@mail.ru

Поступило в Редакцию 14 января 2026 г.

В окончательной редакции 24 февраля 2026 г.

Принято к публикации 27 февраля 2026 г.

Предложена аналитическая модель трения сферического зонда атомно-силового микроскопа о поверхность твердого тела, учитывающая формирование в области контакта деформируемой прослойки конечной толщины. Механический отклик прослойки описывается обобщенным законом Гука. Получена степенная зависимость силы трения от нормальной нагрузки, где показатель степени определяется нелинейностью механического отклика контактной зоны. Модель демонстрирует хорошее согласие с экспериментальными данными и объясняет изменения показателя степени в широком диапазоне.

Ключевые слова: нанотрибология, наноконтакт, нелинейная упругость, сила трения, степенной закон, атомно-силовой микроскоп.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.11.62862.20624

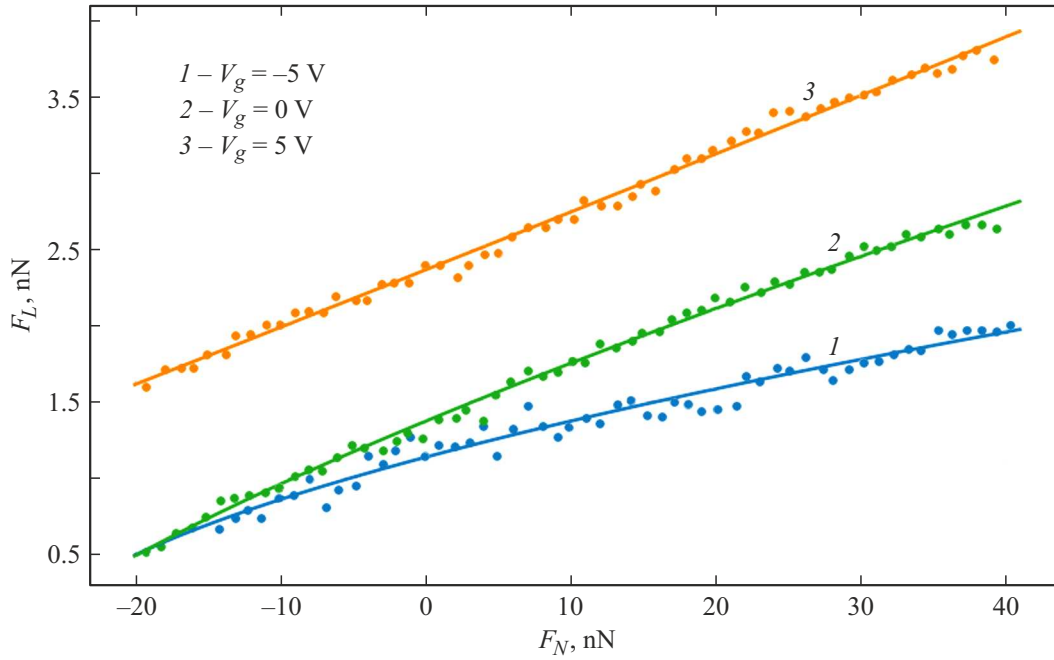
Теоретическое описание нанотрения основано на аналитических моделях Герца, Джонсона–Кендалла–Робертса, Дерягина–Муллера–Топорова и Магиса–Дагдейла [1,2], которые широко применяются для интерпретации экспериментов в атомно-силовой микроскопии (АСМ). Эти модели связывают силу трения с силой нагрузки и упругими свойствами материалов, но не учитывают напрямую атомарную структуру, дискретность контакта и сложные механизмы деформации и износа. Значительное развитие в этой области связано с методом молекулярной динамики (МД) [3–8]. Он используется для анализа наноиндентирования и скольжения, исследования роли дислокаций и фазовых превращений, а также режима прилипания–скольжение. Метод МД также позволяет изучать влияние нагрузки, скорости, температуры и геометрии контакта. Тем не менее накопленные экспериментальные данные показывают, что ни аналитические контактные модели, ни существующие численные подходы не дают универсального объяснения наблюдаемых эффектов. В частности, в наноконтактах регистрируются степенные зависимости силы трения от силы вертикальной нагрузки вида $F_L \propto F_N^\beta$, где показатель β варьируется в широком диапазоне от 0.3 до 1 в зависимости от материала, геометрии контакта и внешних условий. Физическая природа этого показателя остается предметом дискуссий.

В работе [9] был предложен дислокационный механизм нанотрения, в котором контактная зона при сканировании атомарно-гладкой поверхности интерпретируется как петля краевой дислокации, охватывающая область взаимодействия зонда с поверхностью. В рамках этой модели была получена зависимость $F_L \propto F_N^{2/3}$. В ее пользу свидетельствуют аналогия эффекта прилипания–скольжение со скачкообразным движе-

нием дислокаций с вектором Бюргерса, минимальные касательные напряжения при скольжении по плотно-упакованным плоскостям, формирование области „плохого кристалла“ в МД-моделировании и корреляция ускорения зонда с акустической эмиссией. Однако дальнейшие исследования показали, что в реальных условиях контактная зона включает сотни-тысячи атомов и формируется в результате сложного сочетания адгезионных, упругих и электронных взаимодействий. Кроме того, при дислокационной интерпретации границы контакта возникают трудности при количественном сопоставлении с экспериментами, в которых наблюдается изменение показателя β . Это указывает на сложную природу нанотрения, где вклад деформационных, адгезионных, а в ряде случаев и капиллярных эффектов существенно зависит от конкретной трибосистемы, что делает универсальное описание в рамках единственного дислокационного механизма недостаточным.

В настоящей работе гипотеза [9] переосмысливается: область контакта зонда с образцом рассматривается как особая „эффективная прослойка“, где происходят локальные атомные перестройки и имеет место частичная пластичность. Механическое поведение этой прослойки описывается более общим степенным законом [10,11], что качественно соответствует известной модели Огдена [12,13] и данным молекулярной динамики [3–8,14–17]. Последние показывают, что в зоне контакта возникает разупорядоченная дефектная структура, способная к почти обратимым нелинейным деформациям. Такой подход позволяет учесть локальную нелинейность контакта в условиях квазистатического скольжения.

Для изотропного нелинейного материала контактной прослойки связь между нормальным напряжением



Сила трения Si-зонда АСМ в контакте с монослоем MoS₂ на подложке SiO₂/Si как функция нагрузки при различных напряжениях. Параметры F_A и β соответственно равны: 1 — 26.4 nN и 0.6; 2 — 27.2 nN и 0.8; 3 — 65.0 nN и 1.0.

σ_{zz} и относительной деформацией сжатия ε_{zz} задается соотношением

$$\sigma_{zz} = E(\varepsilon_{zz})^\alpha, \quad (1)$$

где E — эффективный модуль упругости, α — показатель нелинейности. При $\alpha = 1$ соотношение (1) переходит в закон Гука, при $\alpha = 0$ описывает идеальное пластическое течение с постоянным напряжением текучести. В классических моделях [1,2] упругие свойства контакта считаются такими же, как у всего материала. Однако этого недостаточно для объяснения экспериментальных данных по нанотрению. Поэтому необходимо рассматривать контактную зону как область с собственными характеристиками, для этого вводится ее эффективная толщина δ_0 . Для вертикальной деформации имеем

$$\varepsilon_{zz}(r) \approx \frac{\delta - r^2/(2R)}{\delta_0}, \quad (2)$$

где δ — глубина внедрения зонда, r — радиальная координата в плоскости контакта, R — радиус кривизны кончика зонда. Соотношение (2) подразумевает, что вертикальная деформация локализована в конечном слое и определяется как отношение сближения поверхностей к толщине этого слоя при условиях $\delta - r^2/(2R) \geq 0$ и $\delta \lesssim \delta_0$. Нормальная сила зонда определяется интегралом напряжений по контактной площади

$$F_N = 2\pi \int_0^a \sigma_{zz}(r) r dr = \frac{2\pi E}{\delta_0^\alpha} \int_0^a \left(\delta - \frac{r^2}{2R} \right)^\alpha r dr, \quad (3)$$

где a — радиус зоны контакта. Путем замены переменной $r^2 = 2R\delta s$ и $r dr = R\delta ds$ формула (3) преобразуется

к виду

$$F_N = \frac{2\pi R E \delta^{\alpha+1}}{\delta_0^\alpha} \int_0^1 (1-s)^\alpha ds = \frac{2\pi R E \delta^{\alpha+1}}{\alpha+1} \frac{1}{\delta_0^\alpha}. \quad (4)$$

Площадь контакта в сферической геометрии $A = \pi a^2 = 2\pi R\delta$, а сила статического трения по формуле Боудена–Тейбора [18] пропорциональна этой площади:

$$F_L = \tau A = 2\pi R\delta\tau, \quad (5)$$

где τ — эффективное касательное напряжение сдвига в контактной области, слабо зависящее от нагрузки. Исключая δ из (4) и (5), получаем

$$F_L = 2\pi R\delta_0\tau \left[\frac{(\alpha+1)(F_\perp + F_A)}{2\pi R\delta_0 E} \right]^\beta, \quad (6)$$

где $\beta = 1/(\alpha+1)$ и учтено $F_N = F_\perp + F_A$ (F_\perp — внешняя нагрузка, действующая на зонд, $F_A > 0$ — сила прижима зонда к образцу за счет адгезии). Таким образом, степенная зависимость силы трения от нагрузки возникает естественным образом из нелинейного механического отклика контактной зоны и геометрии сферического контакта.

Для проверки формулы (6) проведено сравнение с экспериментальными данными из работы [19], что показано на рисунке. В экспериментах изучалась зависимость силы трения кремниевого зонда АСМ от нагрузки на поверхности монослоя MoS₂, нанесенного на подложку SiO₂/Si, при различных напряжениях V_g между зондом

и образцом. Данные [19] выбраны, поскольку в них наблюдается изменение показателя степени β от ~ 0.5 до ~ 1 при изменении V_g , что не описывают классические контактные модели с фиксированным β . Погрешности определения параметров β и F_A составляют 4–16%, а коэффициент детерминации R^2 находится в диапазоне 0.960–0.995, что свидетельствует о хорошем согласовании модели с экспериментом. При нагрузках в десятки наноньютонов и приложенном напряжении до 5 V контактная зона, очевидно, включает не только кончик зонда и монослой MoS_2 , но и часть подложки SiO_2/Si , участвующую в деформации и трении. В рамках предлагаемой модели смещение кривых по оси нагрузок интерпретируется как изменение адгезионной силы F_A , а изменение наклона — как вариация параметра α , характеризующего нелинейность контактной зоны. Микроскопический механизм действия электрического поля (изменение адгезии, зарядовое экранирование, электрон-фононная диссипация) в данной феноменологической модели не рассматривается. Можно лишь отметить, что одновременное изменение F_A и β с полярностью напряжения указывает на тесную связь электронных и механических свойств контактной прослойки; накопление или обеднение носителями заряда модифицирует как силу межатомного взаимодействия, так и нелинейную жесткость контакта.

Отметим, что частный случай при $\beta = 1/2$ ($\alpha = 1$) соответствует линейно-упругому отклику материала прослойки, что согласуется с пределом малых деформаций в моделях нелинейной упругости [10–13]. Другой частный случай при $\beta = 2/3$ ($\alpha = 1/2$) формально воспроизводит показатель степени классической теории Герца [1,2], однако в рассматриваемой модели возникает вследствие нелинейности материала прослойки, а не геометрии полупространства. Это подчеркивает, что одинаковые степенные зависимости силы трения от нагрузки могут реализовываться в различных физических процессах в наноконтакте. Здесь же следует отметить, что в МД-моделировании наноконтактов [14–17] наблюдаются систематические отклонения от теории Герца. Деформация локализована в приповерхностной зоне конечной толщины порядка нескольких межатомных расстояний и характеризуется наличием внутреннего масштабного параметра, аналогичного введенному в настоящей работе параметру δ_0 . В этом смысле использование δ_0 вместо бесконечного полупространства в теории Герца представляется более адекватным описанием физики наноконтакта.

Существенно, что определяющее соотношение (1) накладывает ограничений на обратимость деформаций. В механике сплошных сред степенные законы используются для описания как физически нелинейных упругих материалов (в рамках моделей типа Огдена [12,13]), так и для описания пластического течения с деформационным упрочнением. В последнем случае параметр α соответствует показателю упрочнения, а при $\alpha = 0$ модель вырождается в случай идеальной пластичности

($\sigma = \text{const}$), что дает линейную зависимость силы трения от нагрузки $\beta = 1$. Таким образом, предложенная модель не привязана жестко к конкретному физическому механизму деформации (упругому или пластическому), а, по существу, описывает общий класс задач, в которых локальный отклик материала в зоне контакта подчиняется степенному закону.

По данной работе сделаны следующие выводы. Разработана теоретическая модель трения зонда атомно-силового микроскопа о поверхность твердого тела, учитывающая нелинейный механический отклик контактной зоны и адгезионные взаимодействия. Диссипативные процессы не описываются явно, а параметризуются через эффективное касательное напряжение τ , что соответствует стандартному подходу [1,2]. Модель дает единое описание наблюдаемых степенных зависимостей силы трения от нагрузки и применима в установившемся режиме скольжения.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V.L. Popov, *Contact mechanics and friction. Physical principles and applications* (Springer, Berlin, 2017). DOI: 10.1007/978-3-662-53081-8
- [2] M.P. de Boer, S.S. Shroff, F.W. DelRio, W.R. Ashurst, in *Springer handbook of nanotechnology*, ed. by B. Bhushan (Springer, Berlin, 2017), p. 1417–1435. DOI: 10.1007/978-3-662-54357-3_39
- [3] M.H. Müser, M. Urbakh, M.O. Robbins, *Adv. Chem. Phys.*, **126**, 187 (2003). DOI: 10.1002/0471428019.ch5
- [4] S.D. Kenny, D. Mulliah, C.F. Sanz-Navarro, R. Smith, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **363**, 1949 (2005). DOI: 10.1098/rsta.2005.1621
- [5] L.C. Zhang, K. Mylvaganam, *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **3** (2), 167 (2006). DOI: 10.1166/jctn.2006.001
- [6] Y. Dong, Q. Li, A. Martini, *J. Vac. Sci. Technol. A*, **31**, 030801 (2013). DOI: 10.1116/1.4794357
- [7] S.B. Sinnott, S.J. Heo, D.W. Brenner, J.A. Harrison, D.L. Irving, in *Nanotribology and nanomechanics*, ed. by B. Bhushan (Springer, Cham, 2017), p. 301–370. DOI: 10.1007/978-3-319-51433-8_7
- [8] I. Srivastava, A. Kotia, S.K. Ghosh, M.K.A. Ali, *J. Mol. Liq.*, **335**, 116154 (2021). DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116154
- [9] С.Ш. Рехвиашвили, *ЖТФ*, **72** (2), 140 (2002). [S.Sh. Rekhviashvili, *Tech. Phys.*, **47** (2), 278 (2002). DOI: 10.1134/1.1451982]
- [10] F.M. Borodich, *Adv. Appl. Mech.*, **47**, 225 (2014). DOI: 10.1016/B978-0-12-800130-1.00003-5
- [11] S. Vlase, M. Marin, *Mathematics*, **12** (24), 3992 (2024). DOI: 10.3390/math12243992
- [12] R.W. Ogden, *Non-linear elastic deformations* (Ellis Horwood, 1984).
- [13] G.A. Holzapfel, *Nonlinear solid mechanics: a continuum approach for engineering* (Wiley, 2000).
- [14] B. Luan, M.O. Robbins, *Phys. Rev. E*, **74**, 026111 (2006). DOI: 10.1103/PhysRevE.74.026111

- [15] C. Yang, B.N.J. Persson, *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 024303 (2008).
DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.024303
- [16] S. Solhjoo, A.I. Vakis, *Comput. Mater. Sci.*, **99**, 209 (2015).
DOI: 10.1016/j.commatsci.2014.12.010
- [17] S. Huang, *Nanoscale Res. Lett.*, **12**, 592 (2017).
DOI: 10.1186/s11671-017-2362-8
- [18] F.P. Bowden, D. Tabor, *The friction and lubrication of solids* (Clarendon Press, Oxford, 1986).
- [19] B. Shi, X. Gan, K. Yu, H. Lang, X. Cao, K. Zou, Y. Peng, *npj 2D Mater. Appl.*, **6**, 39 (2022).
DOI: 10.1038/s41699-022-00316-6