

УДК 538.971:539.219.3

©1995

КАРИАТИДНАЯ СТРУКТУРА ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА СИЛОВОГО КОНТАКТА

В.В.Мещеряков

Московский институт стали и сплавов
Поступило в Редакцию 29 сентября 1992 г.

Для решения дискретной контактной задачи использован механизм диффузионного разрушения ступеней поверхности твердого тела. Показано, что структура границы раздела формируется ускоренным переносом силового диполя единичной вакансии и его взаимодействием с внешней силовой нагрузкой. Для большинства элементов в широком интервале температур фактическая площадь контакта с жесткой опорой составляет $\approx (10^4 \text{ nm})^2$ при нагрузках порядка 1 Н. Площадь линейно связана с нагрузкой на контактную пару и не зависит от формы микро- и макрорельефа поверхностей. Сделан вывод о том, что границы раздела имеют кариатидную структуру, образованную *caratides*-атомами опорных террас и *rest*-атомами межтеррасных полостей. Отмечена связь полученных результатов с некоторыми вопросами трения, сверхпроводимости, туннельной спектроскопии и др.

В анализе структуры границы раздела конденсированных сред (силовой контактной пары, зерен или включений фаз в поликристаллах и др.) имеется задача о числе взаимодействующих пограничных атомов. Впервые на нее обратил внимание Томлинсон [1] в связи с проблемами трения. В дальнейшем трение рассматривалось в большей мере с позиций макроскопических экспериментальных и теоретических методов [2], ориентированных на обсуждение вопросов технологии и эксплуатационных свойств материалов. Но лишь в последние годы, в связи с развитием туннельной спектроскопии поверхностей твердых тел, появились работы, содержащие микроскопический анализ структуры взаимодействий в области контакта (например, [3]). Значительным дополнением к такому анализу должно быть решение задачи Томлинсона о числе взаимодействующих пограничных атомов. Рассмотрим некоторые ее стороны на примере механической пары.

Силовой контакт тел произвольной формы должен осуществляться ограниченным числом атомов (*caratides*-атомов [1]), зависящим от внешней нагрузки. С помощью этой предпосылки можно обосновать линейную связь нормальной составляющей нагрузки и силы трения [4], выполняющуюся для широкого (хотя и ограниченного) набора пар трения. Ограниченность числа атомов-кариатид должна также зависеть от свойств соприкасающихся тел и, возможно, от типов и характера распределения неоднородностей контактирующих поверхностей.

Однако отсутствие регулярного эксперимента, позволяющего воспроизводить атомно-идентичные границы раздела, оставляет эти зависимости неопределенными. Площадь соприкосновения дискретного контакта должна в общем случае отличаться от результата решения контактной задачи Герца [5]. Косвенный эксперимент [2] подтверждает это лишь качественно. Распределение атомов на границе раздела контакта, формирующее его структуру, должно подчиняться какому-либо механизму. Но такой механизм пока что не разработан. Используемые для анализа границ фаз геометрические экстра- и интерполяционные схемы в сочетании со статическим варьированием узлов решетки (например, [6]), не решают центральной проблемы, состоящей в определении структурных изменений сред в области границы раздела под влиянием внешних факторов. Между тем ясно, что изменения в кариатидной структуре, возникающие, например, в результате механических силовых воздействий, должны в наибольшей мере влиять на свойства границ и свойства систем, зависящие от свойств границ. С этой точки зрения имеющиеся модельные оценки структуры адсорбированных слоев с последующим обобщением результатов для макроскопических пленок также не определяют механизма распределения атомов на границе. Характерным примером может служить работа [7]. Использование гамильтониана с потенциальной энергией в виде параболических потенциальных ям, распределенных в пространстве по периодической зависимости, заставляет цепочки или слои атомов взаимодействовать, исключая возможность переноса атома относительно статического узла структуры на расстояние, сравнимое с затравочным периодом, (т. е. исключая возможность обрыва межатомной связи, который мог бы моделировать элементарный диффузионный акт). В результате именно это обстоятельство приводит авторов [7] к выводу о возможной реализации сильного напряженного состояния макропленок. Не отрицая в принципе этот вывод, все же можно заметить, что на реальной границе раздела макропленки и подложки развиваются процессы термо- и электродиффузии, диффузии в поле макронеоднородных напряжений, диффузии Киркендалла и др. [8], которые изменяют структуру пленки и снимают большую часть ее напряжений, разбивая ее на зерна и (или) деформируя, смещая границу раздела, приводя к образованию пустот и др.

Данная работа развивает решения дискретной контактной задачи, основанное на динамическом подходе к описанию диффузии атомов конденсированной среды [4,9]. Элементарный диффузионный акт представлен ускоренным поступательным перемещением атома. Этот тип движения составляет основу диффузионного разрушения поверхностных выступов соприкасающихся тел. Диффузионный перенос атома должен приводить к динамическим возмущениям кристалла [10]. При не слишком низких температурах движение атома имеет классический характер и дает основание полагать, что классический отклик среды для основных проявлений диффузии будет доминирующим. Это позволяет воспользоваться моделью сплошной упругой среды, которая тем не менее интегрально учитывает полный отклик, выражая его феноменологически в амплитудах полей смещений. При вычислении отклика приходится пренебрегать эффектами дискретности, рассматривая по-

ля смещений на далеких расстояниях от диффундирующего атома. В этом приближении плотность распределения точечной силы, являющаяся функцией радиус-вектора ускоренно движущегося атома, задается в виде силового мультипольного разложения [4]. Такая постановка диффузионной задачи позволяет представить ускоренное перемещение атома как следствие поглощения коротковолновых деформаций среды, приходящих из бесконечности. Эта ситуация хорошо известна в классической электродинамике [11]: динамические поля, убывающие $\sim r^{-1}$, определяют конечную величину плотности энергии через замкнутую поверхность. Таким образом, решение сводится к анализу динамического отклика решетки, в определении которого статические деформационные эффекты, убывающие $\sim r^{-2}$, выступают лишь в качестве начальных условий. Полная энергия и частота диффузионного движения в предлагаемой задаче вычислены в модели с двумя упругими постоянными. Использованы и другие упрощающие приближения в связи со сложностью структуры полей деформаций. Однако эффект отличия фактической площади контакта от номинальной получается столь значительным, что эти приближения отступают на второй план.

Оценим возможный диапазон площадей контактов, составленных из элементов с чистыми поверхностями. Пусть твердое тело произвольной формы соприкасается n атомами своей поверхности с жесткой опорой (также произвольной формы) под действием силы $N \sim 1 \text{ N}$ (так как пример с макронагрузкой более показателен, силу будем оценивать в ньютонах, а длину в m или nm). Тогда критическая сила f , приходящаяся на одну кариатиду, не должна превосходить величину работы по перемещению атома, отнесенную к межатомному расстоянию. Полагая работу равной энергии диффузии E , а межатомное расстояние — величине $\Omega^{1/3}$, где Ω — атомный объем, получим $f \sim E/\Omega^{1/3}$. Дополнительная внешняя нагрузка на пробное тело, равная f , приведет к перемещению на одно межатомное расстояние одного из атомов на границу раздела и, следовательно, к увеличению числа кариатид на один атом. Поскольку характерные значения энергии $E \sim 10^{-19} - 10^{-18} \text{ J}$, атомных объемов элементов в твердом состоянии $\Omega \sim 10^{-2} - 10^{-1} \text{ nm}^3$, то число атомов-кариатид $n = N/f \sim N\Omega^{1/3}/E \sim 10^8 - 10^9$, фактическая площадь контакта $S_r = n\Omega^{2/3} \sim N\Omega/E \sim 10^7 - 10^9 \text{ nm}^2$ и среднее характерное значение площади $S_r \sim (10^4 \text{ nm}^2)$. Рассматривая в качестве пробного твердого тела квадратный брусок с массой $M = 0.1 \text{ kg}$, характерной плотностью $\rho \sim 10^3 \text{ kg/m}^3$, числом атомов на грани $n_0 = (M/\rho\Omega)^{2/3} \sim 10^{16}$ и номинальной площадью контакта $S_0 = (M/\rho)^{2/3} \sim 10^{-3}$, получим $n/n_0 \sim 10^{-8} - 10^{-7}$ и $S_r/S_0 \sim 10^{-8} - 10^{-6}$ (зависимость $S_r \sim \Omega$ в отличие от $n \sim \Omega^{1/3}$ обуславливает больший разбег значений S_r , хотя $S_r/S_0 = n/n_0$).

Приведенные рассуждения достаточно просты и вряд ли могут вызвать возражения, однако даже верхняя граница оценки площади S_r оказывается меньше имеющихся в [2] ближайших оценок на три порядка. В этой ситуации, конечно, следовало бы обратиться к эксперименту. Однако ориентированные на данную задачу опытные данные,

полученные при условии контроля контактной системы на межатомных расстояниях, по-видимому, отсутствуют.

В дальнейшем будут представлены точные оценки чисел кариатид и фактической площади контакта, вычисленные в рамках описанной выше модели. Они согласуются с качественной оценкой через энергию диффузии. Следствием малости относительной площади контакта является вывод о нетривиальном характере кариатидного строения границ раздела, который может обуславливать ряд значимых физических явлений.

1. Механизм формирования кариатидной границы

Рассмотрим соприкосновение твердого тела со статической абсолютно жесткой опорой под действием нормальной к границе раздела силы N .

При умеренной нагрузке наиболее высокие ступени поверхности твердого тела разрушаются путем диффузионного перемещения атомов контактных террас. Процесс идет за счет встречного перемещения на террасу вакансий, создающих объемные напряжения в решетке кристалла, до возникновения равновесной статической границы раздела. В местах соприкосновения твердого тела с опорой эта граница должна состоять из атомов-кариатид неразрушенных ступеней, образующих более широкие террасы.

Допустим, что в произвольный момент времени процесса разрушения под контактной террасой находится статическая вакансия. Поле ее напряжений можно описать статическим силовым дипольным тензором [12], который зададим в виде векторной диады,

$$\mathbf{P}^{(0)} = \mathbf{f}_0 \otimes \mathbf{r}_0, \quad (1)$$

где \mathbf{f}_0 и \mathbf{r}_0 — дипольная сила и плечо дипольной силы соответственно.

Тогда если к твердому телу, террасы которого расположены в плоскости xy , приложена внешняя сила N вдоль оси z , то диффузионное перераспределение атомов будет идти до тех пор, пока число оставшихся и упруго взаимодействующих с опорой атомов не станет равным

$$n = \frac{N}{f_{0z}}. \quad (2)$$

Таким образом, число кариатид определяется конечным статическим состоянием границы раздела, которое, в свою очередь, определяется начальным статическим упругим полем единичной кристаллической вакансии.

Казалось бы, исходная задача уже решена, поскольку компоненты тензора $\mathbf{P}^{(0)}$ для различных типов точечных дефектов в кристаллах в принципе вычисляемы. Трудность же состоит в том, что тензор, описывающий статическое поле дефекта, должен определяться самосогласованно с динамикой процессов, в которых этот дефект участвует. В данном случае это проявляется во взаимной обусловленности тензора $\mathbf{P}^{(0)}$ и характерной частоты элементарного диффузионного акта, которая состоит в их зависимости от свойств рассматриваемой среды.

Частоту и $P^{(0)}$ можно найти, если представить диффузионный процесс как следствие поглощения упругой энергии кристалла. При таком подходе диффузия определяется самосогласованным описанием динамики движения атома и динамики возмущения решетки кристалла. Перемещение атома описывается ньютоновскими уравнениями движения, деформирование решетки на далеких расстояниях от диффундирующего атома — уравнениями движения сплошной упругой среды.

В соответствии с изложенным дальнейшее аналитическое описание механизма формирования кариатидной структуры границы включает: 1) определение поля смещений статической вакансии и получение уравнения, связывающего f_0 и g_0 с заданными параметрами кристалла; 2) анализ условий статического равновесия кристалла и кинематики диффундирующего атома и получение второго уравнения для f_0 и g_0 , задающего их связь с частотой ω ; 3) введение уравнений динамики переноса точечной силовой неоднородности и вычисление динамического поля смещений и характерной частоты диффузионного процесса ω ; 4) оценку параметров кариатидной структуры: компоненты статической дипольной силы f_{0z} , числа кариатид n и фактической площади контакта S_r .

2. Статическое упругое поле вакансии

Поле смещений сплошной среды $s(\mathbf{r})$, описывающих статическое возмущение решетки кристалла на больших расстояниях от вакансии, удовлетворяет уравнению

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

где $H_{ik,mn}$ — тензор Хуанга [12]. Зададим его в следующем приближенном виде

$$H_{ik,mn} = c_{44} \delta_{ik} \delta_{mn} + (c_{11} - c_{44}) \delta_{ikmn}, \quad (4)$$

где c_{11} — продольная и c_{44} — поперечная упругие постоянные.

Решение уравнений (3) в приближении (4) проводится по стандартной процедуре [12], приводящей к полю смещений,

$$s_i(\mathbf{r}) = \frac{\xi U_{in}^{(0)} x_n}{4\pi c_{44} r_i^3}, \quad (5)$$

где $\xi = (c_{44}/c_{11})^{1/2}$, $r_i = [r^2 - (1 - \xi^2) x_j^2 \delta_{ij}]^{1/2}$, статический тензор

$$U^{(0)} = \begin{bmatrix} \xi^2 f_{0x} x_0 & f_{0x} y_0 & f_{0x} z_0 \\ f_{0y} x_0 & \xi^2 f_{0y} y_0 & f_{0y} z_0 \\ f_{0z} x_0 & f_{0z} y_0 & \xi^2 f_{0z} z_0 \end{bmatrix}.$$

Для составления первого уравнения для f_0 и g_0 воспользуемся приближениями бесконечного кристалла ($\oint sdS = \Omega$) и сферической симметрии упругого поля вакансии ($f_{0x} = f_{0y} = f_{0z}$, $x_0 = y_0 = z_0$).

Для потока вектора \mathbf{s} имеем интеграл

$$\frac{3\xi f_{0z} z_0}{4\pi c_{44}} \int \frac{(xz + yz + \xi^2 z^2) dS}{(x^2 + y^2 + \xi^2 z^2)^{3/2} r} = \Omega,$$

который вычисляется по сферической поверхности и дает уравнение

$$\mathbf{f}_0 \mathbf{r}_0 = \frac{c_{44} \Omega}{K(\xi)}, \quad (6)$$

где

$$K(\xi) = \frac{3\xi^2}{(1 - \xi^2)} \left[1 - \frac{\xi \arcsin(1 - \xi^2)^{1/2}}{(1 - \xi^2)^{1/2}} \right].$$

Второе уравнение для \mathbf{f}_0 и \mathbf{r}_0 можно найти, исключая вращательные степени свободы кристалла, обусловленные диффузионным перемещением атома

$$\varepsilon_{ijk} (\mathbf{f}_0 + \mathbf{f})_j (\mathbf{r}_0 + \mathbf{r})_k = 0, \quad (7)$$

где $\mathbf{r}(t)$ — траектория движения атома, связанная с ньютоновской точечной силой $\mathbf{f}(t)$ уравнением $\mathbf{f}(t) = m d_t^2 \mathbf{r}(t)$, где m — масса атома.

Поясним, что решетка — протяженный объект, на который со стороны атома действует плотность силы $\mathbf{F}_{01} = -\mathbf{f}(t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(t))$. При отсутствии запаздывания в силовом взаимодействии диффундирующего атома и решетки $\mathbf{F}_{01} = -\mathbf{F}_{10}$ — плотности силы, действующей на атом со стороны решетки. Поэтому уравнение (7), содержащее амплитуды соответствующих плотностей сил, эквивалентно уравнениям для моментов плотностей сил.

Далее, зададим для диффундирующего атома кинематику аппроксимационного вида, содержащего неопределенные динамические параметры. Для этого, во-первых, примем, что начальная скорость атома $\mathbf{v}(0) = 0$ и, следовательно, его ускоренное перемещение требует поглощения энергии. Во-вторых, будем полагать, что атом совершает линейный пробег и, поскольку начальное и конечное состояния кристалла статические, возьмем в качестве радиус-вектора диффундирующего атома комбинацию линейной и осциллирующей функций

$$\mathbf{r}(t) = \frac{\mathbf{f}_m}{m\omega^2} (\omega t - \sin \omega t). \quad (8)$$

Параметры \mathbf{f}_m и ω должны быть найдены из законов сохранения импульса и энергии. Подстановка (8) в (7) дает

$$\mathbf{f}_0 = -m\omega^2 \mathbf{r}_0 \quad (9)$$

— одно из условий отсутствия вращения кристалла при диффузионном перемещении атома.

Совместное решение (9) и (6) приводит к соотношениям

$$K(\xi) f_{0z}^2 = c_{44} \Omega m \omega^2, \quad K(\xi) z_0^2 = \frac{c_{44} \Omega}{m \omega^2}. \quad (10)$$

3. Динамика диффузионного акта

Поле смещений, генерируемых ускоренно движущейся в сплошной среде точечной силовой неоднородностью, может быть задано уравнением

$$\rho \partial_t^2 s_i(\mathbf{r}, t) = H_{ik,mn} \partial_m \partial_n s_k(\mathbf{r}, t) + f_i(t) \delta(\mathbf{r}) - P_{in}(t) \partial_n \delta(\mathbf{r}), \quad (11)$$

где ρ — плотность.

Силовая неоднородность уравнения (11) представлена первыми двумя мультиполями плотности силы \mathbf{F}_{01} . Динамическая силовая дипольная диада $\mathbf{P}(t) = [\mathbf{f}_0 + \mathbf{f}(t)] \otimes [\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}(t)]$ в начальный момент времени при заданной кинематике (8) переходит в тензор $\mathbf{P}^{(0)}$. Тензор ускорения координаты атома $d_i^2 \mathbf{r}(t) \otimes \mathbf{r}(t)$ самосогласованно включается в уравнения движения сплошной среды при условии определения динамических параметров \mathbf{f}_m и ω из законов сохранения.

В точке наблюдения $r \gg r(t)$ среда не видит поступательного перемещения мультиполей и в приближении для волновой зоны: $n\bar{r}' \ll \ll c_t \tau \ll \bar{r}$, где \bar{r} — радиус-вектор, масштабированный параметром ξ по соответствующей координате [12], $c_t = (c_{44}/\rho)^{1/2}$ — скорость распространения поперечных деформаций, τ — время диффузионного пробега атома, интеграл уравнений (11), например, для x -компоненты имеет вид [4]

$$s_x(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{4\pi c_{44} \bar{r}} \int d\bar{r}' \left(1 + \frac{n\bar{r}'}{c_t} \frac{\partial}{\partial t'} \right) [f_x(t') - P_{xn}(t') \partial_n] \delta(\bar{r}'),$$

где ретардированное время $t' = t - \bar{r}/c_t$. Дальнейшие вычисления показывают, что трехкомпонентное поле смещений равно

$$s_i(\mathbf{r}, t) = \frac{\xi f_i(t')}{4\pi c_{44} r_i} + \frac{\xi U_{in}(t') x_n}{4\pi c_{44} c_{11} c_t r_i^2}, \quad (12)$$

где

$$U_{in} = \begin{cases} c_{11}(\mathbf{P} - \mathbf{P}_0)_{in}, & i = n, \\ c_{44}(\mathbf{P} - \mathbf{P}_0)_{in}, & i \neq n. \end{cases}$$

Отличительной чертой динамического поля смещений (12) является его убывание с расстоянием по закону r^{-1} , что приводит к конечной величине энергии, протекающей в единицу времени через шаровую поверхность с центром в начале координат и с радиусом r [11].

Часть полной поглощенной энергии, идущая на изменение кинетической энергии атома за время, соответствующее приобретению атомом максимальной скорости, равна

$$E = \int_0^{\tau} dt \oint (H_{im, kn} + H_{in, mk} - H_{ik, mn}) \partial_m s_n^{(1)} \dot{s}_i^{(1)} dS_k = \frac{\omega f_m^2}{8 c_{44}^{1/2} c_{11}^{1/2} c_t},$$

где $s^{(1)}$ — монополярная составляющая смещений (12).

Сравнение E с кинетической энергией атома $2f_m^2/m\omega^2$ при $\omega t = \pi$ дает частоту поглощения

$$\omega = \left(\frac{16c_{44}c_l}{m} \right)^{1/3}, \quad (13)$$

где $c_l = (c_{11}/\rho)^{1/2}$ — скорость распространения продольных деформаций.

Заметим, что, зная частоту ω , можно проводить оценки малого параметра [4] $\xi x(\tau)/c_l \tau \ll 1$, где $x(\tau)$ — часть длины диффузионного пробега атома, соответствующая его движению с поглощением энергии.

4. Характеристики кариатидной структуры границы раздела

Используя (13), (10) и (2), получим силу

$$f_{0z} = \frac{mc_l \omega}{K^{1/2}(\xi)} = \frac{16^{1/3} c_{11} \Omega^{2/3}}{L(\xi)}, \quad (14)$$

где $L(\xi) = K^{1/2}(\xi)/\xi^{5/3}$; число кариатид

$$n = \frac{NL(\xi)}{16^{1/3} c_{11} \Omega^{2/3}} \quad (15)$$

и фактическую площадь контакта

$$S_r = \frac{NL(\xi)}{16^{1/3} c_{11}}. \quad (16)$$

Примечательно, что S_r не зависит от динамических параметров диффундирующего атома и плотности кристалла. Фактическая площадь контакта определяется нагрузкой и упругими характеристиками той составляющей контактной пары, у которой диффузионное перераспределение атомов включает формирование кариатидной границы раздела. Решение задачи фактического контакта не зависит от формы микро- и макрорельефа поверхностей твердых тел.

Качественным подтверждением формулы (16) может служить эмпирическое соотношение Боудена и Тейбора [2,13] $S_r = N/p_T$, (p_T — давление текучести более мягкого материала), полученное как обобщение опытных данных по электропроводности металлических контактов. По аналогии с этим соотношением формулу (16) можно записать в виде $S_r = N/p_{11}$, где $p_{11} = 16^{1/3} c_{11}/L(\xi)$ — давление, развиваемое диффундирующим атомом, на поверхность кристаллической ячейки при обрыве продольной связи между атомами. В приближенной оценке $S_r \sim \sim N\Omega/E \sim N/p_E$, где величина $p_E = E/\Omega \sim p_{11} \sim c_{11} \sim 10^9 - 10^{11}$ Н/м² попадает в характерный диапазон значений упругой постоянной c_{11} .

Здесь надо заметить, что обнаруженная Боуденом и Тейбором линейная зависимость $S_r \sim N$ оказалась в свое время неожиданной, поскольку в упругой задаче Герца, например, для соприкасающихся шаров с идеальными поверхностями $S_r \sim N^{2/3}$. В дальнейшем возникла

многочленная дискуссия, связать ли этот результат с пластическим деформированием контакта или же (при упругом контакте) с формой микрорельефа поверхности и характером распределения его неоднородностей [2]. Высказывались и другие, более сложные гипотезы, однако отсутствие однозначных экспериментальных данных по-прежнему оставляет проблему дискуссионной.

Возвращаясь к диффузионной задаче о границе раздела, найдем относительное число кариатид. Если твердое тело в форме куба с ребром $l = (n_l^3 \Omega)^{1/3}$ (где n_l^3 — полное число атомов) находится на статической опоре под действием нормальной силы N , равной сумме внешней силы Q и силы тяжести Mg , то отношение числа кариатид к числу атомов на грани куба

$$q = \frac{n}{n_l^2} = \frac{L(\xi)}{16^{1/3} c_{11}} \left(\frac{Q}{l^2} + \rho g l \right). \quad (17)$$

При $l_e = (2Q/\rho g)^{1/3}$ отношение (17) имеет минимум

$$q_e = \frac{3(\rho g)^{2/3} Q_e^{1/3} L(\xi)}{4c_{11}}, \quad (18)$$

соответствующий нагрузке $Q_e = Mg/2$.

Оценки проведем для Na с упругими постоянными [14], представленными в таблице, для случая $Q_e = 1$ N. Помимо значений q_e , вычисленных по формуле (18), в таблице приведены также число кариатид $n_e = q_e n_{l,e}^2$, где $n_{l,e}^2 = (2Q_e/\rho g \Omega)^{2/3} = 3.0 \cdot 10^{16}$ — полное число атомов на плоскости грани экстремального куба, фактическая площадь контакта $S_r = n_e \Omega^{2/3}$ и число невзаимодействующих с опорой поверхностных атомов (rest-атомов), приходящихся на одну кариатиду, $p_e = n_{l,e}^2/n_e$, которое более наглядно иллюстрирует ситуацию.

Рассмотрим некоторые аспекты полученных результатов.

1) Оценки величины p_e показывают, что куб Na с ребром $l_e = 6.0 \times 10^{-2}$ м, находящийся на абсолютно жесткой опоре под действием силы $N_e = 3$ N, взаимодействуют с ней лишь одним из каждых $2.1 \cdot 10^8$ атомов своей грани при $T = 100$ K и $1.6 \cdot 10^8$ — при $T = 350$ K.

2) Оценка фактической площади контакта $S_r \sim 10^{-11}$ м² сильно отличается от оценки $S_r = N/p_T \sim 10^{-6}$ м² (для щелочных металлов $p_T \sim 10^6$ Pa при $T \simeq 300$ K), но согласуется с качественной оценкой через энергию диффузии. Установление точной связи числа кариатид

Упругие постоянные и некоторые параметры кариатидной структуры границы раздела твердого Na и более жесткой опоры, соприкасающихся под действием силы, равной 3 N.

T, K	$c_{44}, N/m^2$	$c_{11}, N/m^2$	q_e	n_e	S_r, m^2	p_e
100	$5.8 \cdot 10^{-9}$	$8.5 \cdot 10^{-9}$	$4.8 \cdot 10^9$	$1.5 \cdot 10^{-8}$	$1.7 \cdot 10^{11}$	$2.1 \cdot 10^8$
350	$4.0 \cdot 10^{-9}$	$7.4 \cdot 10^{-9}$	$6.2 \cdot 10^9$	$1.9 \cdot 10^{-8}$	$2.2 \cdot 10^{11}$	$1.6 \cdot 10^8$

и энергии диффузии (даже в рамках излагаемого подхода) не является простой задачей и требует отдельного рассмотрения. Другие подходы к оценкам фактической площади контакта [2] определяют S_T лишь функционально с точностью до амплитуды и совместно с экспериментальной проблемой контролируемости границ раздела и также не позволяют однозначно сравнить результаты, представленные в таблице с другими исследованиями.

3) Малое относительное число кариатид $n_e \sim 10^{-8}$ может объяснить тот факт, что твердые тела с чистыми поверхностями при соприкосновении под умеренной нагрузкой сохраняют свои индивидуальные физические свойства.

4) Зависимость $q(Q_e)$ слабая и с ростом Q_e не приводит к качественному изменению оценок в нормальном диапазоне давлений.

5) Температурная зависимость числа кариатид при отсутствии фазовых превращений соприкасающихся тел также оказывается весьма слабой, точнее соответствующей температурному ходу упругих постоянных.

Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что в широком температурном интервале под действием умеренных нагрузок граница раздела статического контакта элементов с чистыми поверхностями состоит их областей двух типов. Первый — это опорные контактные террасы, которые образованы *caratides*-атомами и занимают относительно малую долю площади контакта. Второй — межтеррасные полости, образованные *rest*-атомами соприкасающейся пары. Формирование опорных террас и межтеррасных полостей происходит путем последовательного переноса атомов и вакансий по кристаллу при изменениях внешних силовых воздействий. Поскольку деформация сред так или иначе связана с пространственным переносом атомов, то ясно, что диффузионный механизм остается в силе для любого возможного случая границ раздела. Так, наиболее чувствительные к неоднородностям решетки низкотемпературные эксперименты по электропроводности [15] указывают на идентичность физической картины явлений на голой поверхности и на поверхности срачивания бикристаллов. Подмеченная в [15] идентичность косвенно подтверждает также и то, что при умеренных силовых нагрузках, реализующихся в бикристаллах, фактическая площадь контакта зерен с большими углами разориентировки оказывается ничтожно малой величиной, не дающей вклада в изменения кинетических свойств граничащих поверхностей.

Аналогичное строение границ раздела должно иметь место и в переходных областях некогерентного сопряжения двойниковых комплексов в полидоменных кристаллах [16]. Подтверждением этого могут быть результаты электронно-микроскопического анализа сверхпроводящих керамик [16,17]. Судя по изображению кончиков двойников, характерный поперечный размер межтеррасных полостей, образующихся при переходе сверхпроводника $Y-Ba_2-Cu_3-O_{7-x}$ из тетрагональной фазы в ромбическую, может составлять от 40 до 50 Å.

Основываясь на изложенном материале, нетрудно предположить, что существование межтеррасных полостей и контактных террас должно оказывать сильное воздействие на свойства границ раздела статических контактных систем, свойства поликристаллов и дисперсных систем. Так, межтеррасные полости могут служить накопителями или

источниками газов и примесей, содержать элементы в атомарном состоянии, влиять на оптические свойства (например, поликристаллов), определять герметичность контактных систем, являться эффективными центрами пиннинга вихрей Абрикосова, определять характер двумерной проводимости [15] и туннельную составляющую тока электронов через границу раздела или действовать в качестве джозефсоновских переходов [18]. Контактные террасы могут определять трение покоя и взаимную диффузию контактных пар, контактную тепло- и электропроводность, усталостное разрушение контактных систем и поликристаллов, зернограничное проскальзывание и др.

В заключение рассмотрим нагрузки внешней силой, при которой тело будет соприкасаться с опорой не более чем в одной точке. Полагая $n = 1$ в (15), получим $N = f_{0z}$ — силу, характеризующую силовое дипольное возмущение среды единичной вакансией и определяемую формулой (14). Возвращаясь к границам двойников в сверхпроводниках, можно предположить, что равновесный кончик двойника, по-видимому, представляет именно этот случай. Но в зависимости от характера напряжений в двойниковых областях, определяемого внешними силовыми воздействиями, термоциклированием, близостью двойника к границе двойникового комплекса и др., контактные террасы двойников могут содержать различное число атомов или исчезать вовсе. Это хорошо видно по изображениям кончиков двойников в $Gd-Ba_2-Cu_3-O_{7-x}$ [19] и в $Y-Ba_2-Cu_3-O_{7-x}$ [17].

Для твердого Na случай $n = 1$ приводит к оценке $f_{0z} \approx 10^{-9} N$, которая доступна для экспериментальной проверки на атомно-силовом или туннельном микроскопах. Более обстоятельное выяснение механизма образования кариатидной структуры границы раздела возможно при реализации эксперимента с контролируемым многоатомным острием [19,20].

Отметим, что допущение абсолютной жесткости опоры, потребовавшееся в связи с описанием диффузии лишь в одном из соприкасающихся тел, исключает из рассмотрения особенности межатомных взаимодействий через границу, а упругое приближение — возможность отличить кристаллы с разным типом проводимости. Тем не менее для любых вариантов можно ожидать сохранения порядка рассчитанных величин, поскольку диффузионное перемещение атома имеет классический характер и вклады от возмущения электронных подсистем кристалла, опоры и диффундирующего атома должны быть не очень большими. Их учет требует расширения постановки задачи о границе раздела.

Более перспективным после преодоления представляется следующее, неявно сделанное в работе допущение. Вычисление параметров кариатидной структуры не является самосогласованным в том смысле, что статическая сила N , выпадающая из уравнений движения (11), не влияет на структуру поля деформаций (12). Включение такого самосогласования связано с необходимостью учета дискретности электронных уровней ускоренно движущегося атома.

Список литературы

- [1] Tomlinson I. // *Phill. Mag.* 1929. V. 7. P. 905–939.
- [2] Крагельский И.В., Добычин М.Н., Колбачков В.С. Основы расчетов на трение и износ. М., 1977. 526 с.
- [3] Zhong W., Tomanek D. // *Phys. Rev. Lett.* 1990. V. 64. N. 25. P. 3054–3057; Motohisa Hirano, Kasumasa Shinjo // *Phys. Rev. B.* 1990. V. 41. N 17. P. 11837–11850.
- [4] Мещеряков В.В. // *ФТТ.* 1992. Т. 34. № 4. С. 1198–1205.
- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория упругости. М., 1987. 244 с.
- [6] Wang C.J., Vitek V. // *Acta Met.* 1986. V. 34. N 5. P. 951–960; Штремель М.А. // *ФММ.* 1990. № 5. С. 15–21.
- [7] Большов Л.А., Вещунов М.С., Дыхне А.М. // *ЖЭТФ.* 1981. Т. 80. № 5. С. 1997–2003.
- [8] Стриха В.И., Бузанева Е.В. Физические основы надежности контактов металл–полупроводник в интегральной электронике. М., 1987. 254 с.
- [9] Мещеряков В.В. // *ФТТ.* 1992. Т. 34. № 6. С. 1702–1704.
- [10] Manning J.R. *Diffus. Anal. and Appl.: Proc. Sump. TMS Fall Meet. Chicago.* 1989. P. 3–17.
- [11] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М., 1988. 509 с.
- [12] Лейбфрид Г., Бройер Н. Точечные дефекты в металлах. М., 1981. 439 с.
- [13] Bowden F.P., Tabor D. // *Proc. Roy. Soc.* 1939. V. 169. N 938. P. 391–413.
- [14] Landolt-Bornstein H. *Zahlenwerte and Funktionen aus Naturwissenschaften and Technik.* Gr. III. B 11. N.Y., 1979. 854 p.; Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. Киев, 1982. 286 с.
- [15] Вул Б.М., Заварицкая Э.И., Сокол Е.Г. // *ЖЭТФ.* 1981. Т. 80. № 4. С. 1639–1644.
- [16] Осипьян Ю.А., Афонникова Н.С., Емельченко Г.А., Парсамян Т.К., Шмытько И.М., Шехтман В.Ш. // *Письма в ЖЭТФ.* 1987. Т. 46. № 5. С. 189–192.
- [17] Sarikaya M., Kikuchi R., Aksay I.A. // *Physica C.* 1988. V. 152. N 2. P. 161–170.
- [18] Deutscher G., Muller K.A. // *Phys. Rev. Lett.* 1987. V. 59. N 15. P. 1745–1747.
- [19] Осипьян Ю.А., Афонникова Н.С., Батова Д.Е., Гончаров В.А., Емельченко Г.А., Инденбом М.М., Суворов Э.В., Шехтман В.Ш., Шмытько И.М. // *ФТТ.* 1989. Т. 31. № 3. С. 131–138.
- [20] Snyder E.J., Eklund E.A., Williams R.S. // *Surface Sci.* 1990. V. 239. N 1–2. P. 487–492.