

01;11

## АТОМНЫЙ МЕХАНИЗМ КОГЕЗИОННОГО ТРЕНИЯ В КОМПЬЮТЕРНОМ ЭКСПЕРИМЕНТЕ

© В.В.Покропивный, В.В.Скороход

В последнее время в связи с развитием атомно-силовой микроскопии стало возможным исследовать на атомном уровне многие контактные явления, и в частности трение [1,2]. Это стимулировало развитие фрикционного силового микроскопа [3] и нанотрибологии. Согласно существующим представлениям, восходящим к молекулярной теории Дерягина [4], сила трения есть сумма двух составляющих: деформационной и адгезионной. Ландман с сотрудниками [5] впервые смоделировал трение в атомно-силовом микроскопе методом молекулярной динамики и обнаружил пластическую деформацию поверхностей. Первое сообщение об атомном механизме схватывания и прилипания атомов нетугоплавкого острия в атомно-силовом микроскопе сделано нами в работе [6]. Согласно современному определению, "трение — диссипативный процесс возникновения и разрушения физико-химических связей на контакте двух тел ..." [7], однако, как это происходит на атомном уровне, до сих пор неизвестно.

В настоящей работе описаны первые наблюдения в компьютерных экспериментах элементарного акта когезионного трения и атомного механизма когезионного изнашивания и заедания наносероховатости.

Для моделирования процесса трения разработан комплекс программ СИДЕМ/АСМТ с применением стандартного метода молекулярной динамики. Ползун, имитирующий шероховатость, моделировался в виде параболоида вращения. Поверхность трения в плоскости  $(x, z)$  моделировалась в виде грани (114) ОЦК-кристаллита в форме параллелепипеда, состоящего из нескольких ячеек решетки совпадающих узлов с обратной плотностью  $\sum = 9$ . В качестве материала острия и поверхности выбрано  $\alpha - \text{Fe}$ . Для придания жесткости верхние атомы острия, а также боковые и нижние атомы подложки жестко закреплялись. Учитывая возможную механическую нестабильность острия [8], следует предъявить повышенные требования к стабильности потенциала — он должен гарантировать полное восстановление стабильной структуры. В качестве критерия последней принималась остаточная кинетическая энергия, которая в

расчете на один атом не должна превышать  $10^{-8}$  эВ. Учитывая, что релаксация в области границ определяется короткодействующей природой межатомных взаимодействий [9], использовали надежный парный потенциал Джонсона [10], в радиус действия которого ( $1.2A$ ,  $A = 0.286$  нм — постоянная решетки) попадают две координационные сферы.

Процесс трения моделировался в виде перемещения острия с шагом  $\Delta x$  вдоль атомного ряда  $\langle 114 \rangle$  по оси  $X$  на поверхности. На каждом шаге выполнялась динамическая релаксация. Путем суммирования парных связей между острием и поверхностью, попадающих в сферу действия потенциала, рассчитывалось число адгезионных связей  $N_a$ , энергия  $E_a = -\sum \varphi(r_{ij})$  и сила  $F_a = -\sum d\varphi(r_{ij})/dr_{ij}$  адгезии (схватывания), где  $\varphi(r_{ij})$  — потенциал взаимодействия между атомами поверхности  $i$  и острия  $j$ . В зависимости от соотношения направления силы адгезии с направлением движения сила адгезии может выступать в качестве подъемной силы, силы нагрузки, тяги и трения. Последняя возникает при: 1) отталкивании атомов при сближении; 2) притяжении атомов при удалении. Силу трения определим как разность латеральной компоненты силы адгезии на  $n$  и  $n-1$  шаге  $F_f = F_a^n - F_a^{n-1}$ .

Изображение плоского среза структуры контакта по плоскостям  $(100)$  ползуна и  $(110)$  поверхности выводилось программой визуализации на экран компьютера. В итоге динамика процесса трения представляется на экране в виде цветного мультфильма. Приведенные ниже рисунки представляют собой фрагменты черно-белой распечатки с дисплея. Темными кружками показаны атомы в плоскостях  $(110)$  с  $z = 0$  и  $z = 0.707A$ . Светлый кружок под темным показывает стартовое положение атома до скольжения и релаксации. Отрезками между атомами показаны адгезионные связи между атомами острия и подложки.

В зависимости от условий нагружения возможны несколько сценариев развития процесса трения. Сценарий № 1. Соответствует случаю висячего ползуна без нагрузки. Траектория движения — прямая линия, проходящая параллельно поверхности на расстоянии  $h$ . На каждом шаге смещаются все атомы ползуна, даже если они прилипают к поверхности. Тем самым моделируется увлечение движущимся острием схватившихся атомов, т. е. вязкое течение (внутреннее трение). Сценарий № 2. Соответствует опорному ползуну, на который действует постоянная внешняя сила  $P$ . Для ее учета кроме скольжения все атомы острия смещались с шагом  $\Delta y = 0.01A$  по нормали к поверхности до равновесия с упругой отталкивающей силой реакции  $P = F_a$ . Траектория движения — линия постоянной силы.

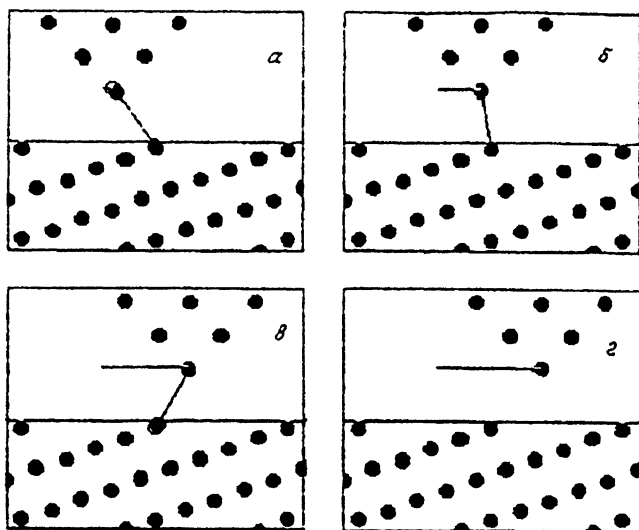


Рис. 1. Эволюция атомной структуры в элементарном акте когезионного трения с зазором  $h = A$  без нагрузки по сценарию № 1.

В сущности, это модель атомно-силового микроскопа. Нагрузка перераспределяется на все атомы острия, поэтому изменение его формы есть результат вязкого течения и пластической деформации.

Шаг  $\Delta x$ , с которым перемещалось острие, определяет скорость его движения  $v = \Delta x / \Delta t$ , где  $\Delta t$  — шаг по времени в процедуре релаксации. В нашем случае  $\Delta t = 2\phi$  и  $\Delta x = 0.01A$ , что втрое меньше амплитуды тепловых колебаний при  $T = 300\text{ К}$ . Таким образом, острие перемещалось с дозвуковой скоростью  $v = 1430\text{ м/с}$ . На каждом шаге трибосистеме предоставлялось достаточно времени, чтобы отрелаксировать до стабильной структуры. В отдельные моменты сильного взаимодействия острия с подложкой скорость падала до  $5\text{--}30\text{ м/с}$ . Тем самым моделировалось наблюдаемое при трении неравномерное движение со средней скоростью  $\approx 200\text{ м/с}$  (процесс прилипания–скольжения).

Опыты показывают, что динамику квазихаотического изменения силы трения расшифровать трудно. Поэтому сначала целесообразно изучить элементарный акт когезионного трения, когда между острием и поверхностью действует только одна связь притяжения. Но даже в этом случае сила трения ведет себя сложным образом.

Результаты компьютерного моделирования элементарного акта когезионного трения атомно-острого ползуна радиусом  $R = 0.5A$  на расстоянии  $h = A$  от поверхности по сценарию № 1 представлены на рис. 1 и 2. Броса-

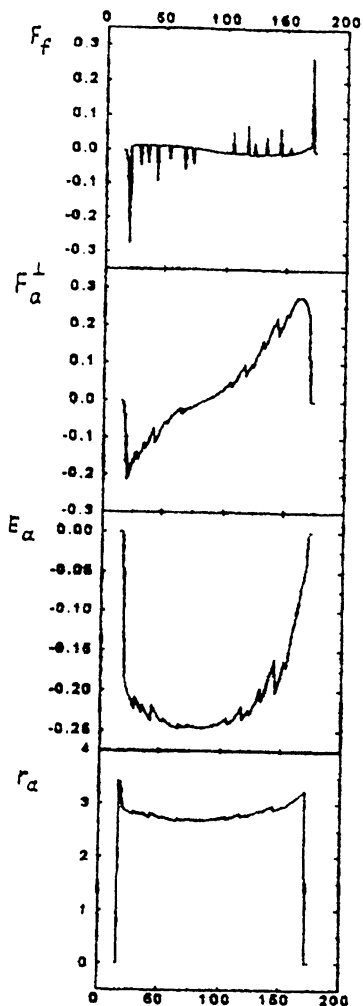


Рис. 2. Динамика изменения длины адгезионной связи  $r_a$  (Å), энергии адгезии  $E_a$  (эВ), нормальной компоненты силы адгезии  $F_a^\perp$  (эВ/Å) и силы трения  $F_f$  (эВ/Å) на  $n$ -м шаге элементарного акта когезионного трения, показанного на рис. 1 (Å = 0.1 нм).

ется в глаза скачкообразное изменение всех величин на рис. 2. Сопоставление структуры (рис. 1) и численных характеристик (рис. 2) показывает следующее. Первый резкий пик-минимум силы трения вызван образованием новой межповерхностной связи. Выступающий атом поверхности и атом кончика острия резко сближаются, энергия и си-

да схватывания скачком возрастают. Это вызывает сильную анизотропную релаксацию соседних атомов, а именно: атомы острия и поверхности смещаются в направлениях  $\langle 111 \rangle$ , образуя цепочки атомных смещений краудинного типа, наподобие смещений около междоузельного атома [11] (рис. 1, а). При скольжении со скоростью 1430 м/с структура и численные характеристики изменяются незначительно. Заметное выделение энергии адгезии происходит в моменты резкого растяжения связи. Это вызывает отрицательные скачки силы трения на 23, 31, 40, 46, 54 и 67 шаге. На 67 шаге выступающий атом поверхности, атом на кончике острия и смещенные атомы возвращаются в невозбужденные состояния (рис. 1, б). После 86 шага начинается удаление острия от выступающего атома, растяжение связи, уменьшение энергии и силы схватывания, а вместе с этим — постепенное увеличение силы трения. На 109, 119, 129 и 140 шагах происходит резкое сжатие связи, скачкообразное изменение энергии и силы схватывания. При этом снова возникает цепочка смещений атомов поверхности в направлении  $\langle 111 \rangle$  (рис. 1, в). Это вызывает скачки силы трения, только положительные, так как при удалении  $x$ -компонента сила схватывания направлена в сторону, противоположную движению. Последний пик-максимум силы трения на 166 шаге обусловлен разрывом парной связи. После этого все смещенные атомы возвращаются в невозбужденные состояния, что зафиксировано на рис. 1, г. Поскольку скорость релаксации больше скорости скольжения, образование и разрыв связей происходит резко. Поэтому первый и последний скачок силы трения больше остальных, что согласуется с экспериментом [12].

Повторим этот эксперимент, но с меньшим зазором  $h = 0.5A$ . Силы адгезии и трения испытывают характерные квазихаотические непериодические скачки. В моменты наибольшего взаимодействия сила схватывания атома острия с поверхностью может превысить силу связи со своими атомами острия. В этом случае атом острия перескакивает на поверхность и прилипает к ней над поверхностными лунками, продолжая застройку идеальной решетки подложки. Это можно назвать фрикционной эпитаксией при когезионном трении. На рис. 3 зафиксирован момент фрикционного осаждения двух атомов и отрыва третьего из первого и второго слоя наноползуна. В этом сущность атомного механизма когезионного изнашивания.

На рис. 4 представлен результат компьютерного эксперимента по трению атомно-острой шероховатости по сценарию № 2 под нагрузкой. В отличие от предыдущего случая прижимающая сила приводит к пластической деформации, течению и когезионному заеданию ползуна. В результате сила трения увеличивается, а его изнашивание интенсифи-

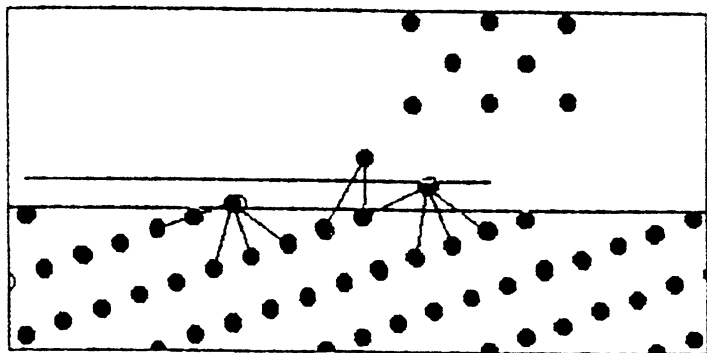


Рис. 3. Фрикционная эпитаксия и когезионное изнашивание при трении висячей наношероховатости на расстоянии  $h = 0.5A$  от поверхности по сценарию № 1.

дируется. Проследить корреляцию силы трения, схватывания, энергии адгезии и структуры в таком сложном процессе пока невозможно.

Как известно, в системах с поглощением и выделением энергии возможны автоколебания. Их частота зависит от свойств системы, в нашей модели — от кристаллографических, упругих свойств и химических связей трибосистемы. Пользуясь предложенным механизмом, можно оценить частоту возбуждений или вынужденных колебаний. Она равна частоте проходов зон активации атомных смещений  $\omega = N \cdot v/L$ , где  $N$  — число неровностей на поверхности (для когезионного трения — выступающих атомов) на единицу длины  $L$ . Учитывая существование шероховатостей на всех структурных уровнях (нано-, мезо-, микро-, макро-скопическом), можно говорить о широком спектре фрикционных возбуждений. При скорости  $v = 200$  м/с для пилообразной поверхности 6-го класса точности с шероховатостью  $R_a = 1.6$  мкм получим  $\omega \approx v/R_a = 10$  КГц. Для поверхности 14-го класса точности ( $R_a = 10$  нм)  $\omega = 2$  МГц. В нашем случае она намного выше  $\omega = 12/1229\Delta t \approx 5$  ТГц. Эта задающая частота определяет частоту автоколебаний трибосистемы. Методы расчета изложены в монографии [12]. Соколофф рассчитал спектр фрикционных колебаний в линейной цепочке с учетом ангармоничности [13]. Пики силы трения могут возбуждать распространение нелинейных волн. В моменты сильного взаимодействия, особенно при разрыве адгезионных связей, цепочки атомов вдоль направлений  $\langle 111 \rangle$  находятся в условиях сильного растяжения. А в нагруженных атомных цепочках, как показано в работе Сабирова [14], возможно распространение солитонов и кноидальных волн.

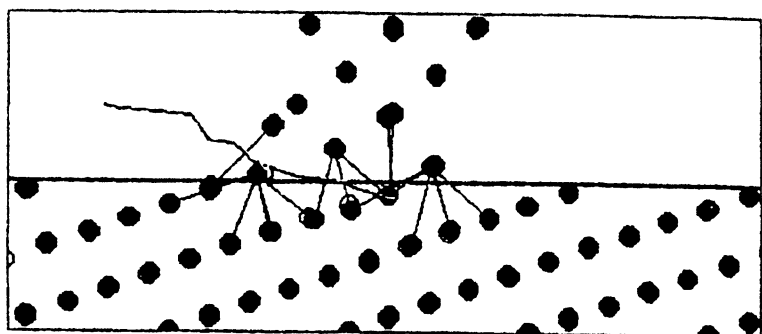


Рис. 4. Течение и когезионное заедание при трении опорной наношероховатости под нагрузкой  $P = 3.2 \text{ нН}$  по сценарию № 2.

Недавно Пирсов [15] в модели пружин-блоков описал трение как процесс прилипания-скольжения, наблюдаемый экспериментально. Сила трения изменялась пилообразно, а у нас — скачкообразно. Эта модель основана на предположении о том, что верхний бесконечно тонкий слой поверхности в начале каждого периода (зуба) смещается, а в конце — останавливается. Иными словами, этот слой может пребывать в двух состояниях — твердом закрепленном и жидкоподобном текущем, осциллируя между ними. Обнаруженный нами механизм трения вскрывает физическую сущность этого допущения. На самом деле смещается не слой поверхности, а плотноупакованные атомные ряды в решетках подложки и ползуна.

Процессы когезионного изнашивания и заедания, показанные на рис. 3 и 4, представляют два новых вида механической неустойчивости острия в контакте с поверхностью наряду с когезионной лавиной [8].

Таким образом, когезионное трение представляет собой комплексный процесс образования, сжатия, растяжения и разрыва когезионных связей между острием и поверхностью, который сопровождается диссипацией и возвратом упругой энергии, возбуждением цепочек атомных смещений и нелинейных колебаний, перескоков и эпитаксиального осаждения атомов, деформацией и течением ползуна. Мгновенная сила трения определяется разностью сил схватывания, которая зависит от многих факторов. Соотношение скоростей скольжения и релаксации атомной структуры, а также радиуса действия межатомных сил определяет число межповерхностных связей в каждый момент времени, а последняя — энергию и силу схватывания. Вместе с модулями упругости  $C_{ij}$  и вязкости  $\eta_{ij}$ , кристаллографией и типом химической связи они определяют частоту автоколебаний. Среднюю силу и коэффициент трения можно найти из ра-

венства работы адгезии и энергии диссипации. В результате выстраивается следующая цепь причинно-следственных связей в процессе когезионного трения

$$N_a(v, \Delta t, r_k) \Rightarrow E_a[\varphi(\tau)] \Rightarrow F_a[\varphi'(\tau)] \Rightarrow F_f(F_a, \omega(C_{ij}, \eta_{ij})).$$

Найденные взаимосвязи должны быть учтены при построении атомно-кинетической и реологической теории трения, связывающей характеристики внешнего и внутреннего трения.

### Список литературы

- [1] *Mate C.M., McClelland G., Erlandsson R. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. N 17. P. 1942-1945.
- [2] *German G.J., Cohen S.R., Neubauer G. et al.* // J. Appl. Phys. 1993. V. 73, N 1. P. 163-167.
- [3] *Fujisawa S., Kishi E., Sugawara Y., Morita S.* // Jpn. J. Appl. Phys. Pt. 1. 1994. V. 33. N 6B. P. 3752-3755.
- [4] *Дерягин Б.В., Кротова Н.А., Смилга В.П.* Адгезия твердых тел. М.: Наука, 1973.
- [5] *Landman U., Luedtke M.D., Ribarsky M.W.* // J. Vac. Sci. Technol. 1989. V. 7. N 4. P. 2829-2839.
- [6] *Покропиеный А.В., Покропиеный В.В., Скороход В.В.* // Письма в ЖТФ. 1996. Т. 22. N 2. С. 1-7.
- [7] *Зильберг Ю.В.* // Трение и износ. 1991. Т. 12. № 5. С. 884-890.
- [8] *Sutton A.P., Todorov T.N.* // J. Phys. Chem. Sol. 1994. V. 55. N 10. P. 1169-1174.
- [9] *Merkle K.L., Wolf D.* // Mat. Sci. Forum. 1993. V. 126-128. P. 65-68.
- [10] *Johnson R.A.* // Phys. Rev. 1964. V. 134A. N 5. P. 1329-1336.
- [11] *Покропиеный В.В., Огородников В.В., Ракицкий А.Н.* // Металлофизика. 1989. Т. 11. № 3. С. 113-114.
- [12] *Крагельский И.В., Гумис Н.В.* Фрикционные автоколебания. М.: Наука, 1987.
- [13] *Sokoloff J.B.* // Phys. Rev. B. 1995. V. 52. N 10. P. 7205-7214.
- [14] *Сабиров Р.Х.* // ФТТ. 1995. Т. 37. № 1. С. 91-100; 130-136.
- [15] *Persson B.N.J.* // Phys. Rev. B. 1994. V. 50. N 7. P. 4771-4786.

Поступило в Редакцию  
18 марта 1996 г.