

01;05

## Диссипативные процессы в сплавах при проявлении эффекта безыносного трения

© Т.А. Шахназаров, Ю.А. Тахтарова, Т.С. Лугуев

Институт физики Дагестанского научного центра РАН,  
367003 Махачкала, Россия  
e-mail: oftpm@rambler.ru

(Поступило в Редакцию 16 января 2006 г.)

Изучены диссипативные процессы при трении скольжения, связанные с самопроизвольным формированием поверхностных слоев из определенного материала и обеспечивающие эффект безыносного трения. Проанализировано динамическое состояние таких слоев с учетом больших пластических деформаций. Исследован микромеханизм получения двухфазной структуры поверхностных слоев с помощью метода молекулярной динамики. Произведена термодинамическая оценка поведения системы в процессе проявления эффекта безыносного трения. Полученные результаты позволяют прогнозировать эффект безыносного трения в заданном диапазоне внешней нагрузки.

PACS: 81.40.Pq

### Введение

При трении с возрастанием скоростей и удельных нагрузок, ухудшением условий смазки и повышением требований к КПД механизмов возрастает роль процессов, принципиально изменяющих поведение антифрикционных материалов на основе самоорганизации. В термодинамическом исследовании [1] было показано, что в основе самопроизвольного возникновения упорядоченных структур при надлежащей интенсивности внешнего воздействия лежит квадратичная зависимость диссипации энергии от скорости деформации материала при трении скольжения. Такой подход позволяет принципиально объяснить процесс формирования диссипативных структур и наблюдаемые экстремальные зависимости коэффициента трения и интенсивности изнашивания от внешней нагрузки, определяющие эффект безыносного трения (снижение интенсивности изнашивания на 1–3 порядка). Но причина появления эффекта в определенном диапазоне скоростей и нагрузок остается невыясненной.

К общим структурным признакам проявления эффекта безыносного трения необходимо отнести интенсивную фрагментацию и образование мелкозернистого слоя, появление большого количества скоплений дефектов, реализацию ротационных мод пластической деформации, аморфизацию межзеренных границ. В медных сплавах этот эффект достигается в результате комплексного физического и физико-химического воздействия, когда наряду с деформацией поверхностного слоя протекают процессы взаимодействия составляющих сплава со смазкой, обеспечивая избирательный перенос компонентов [2], или со специально введенными поверхностными покрытиями [3]. В антифрикционных сплавах на алюминиевой основе эффект безыносного трения реализуется только за счет высокой пластичности „мягкой“ структурной составляющей сплава (свинца, олова), которая в

процессе трения создает поверхностный слой и обеспечивает высокие антифрикционные характеристики [4].

В рассматриваемом аспекте интересен результат, полученный в [3] при работе медно-графитовых материалов в условиях высокоскоростного (50 м/с) скольжения по нержавеющей стали без покрытия (в режиме сухого трения). Анализ по методу рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии показал [3], что на глубине до 0.1 мкм поверхностный слой состоит практически из углерода, а примеси меди, являющейся основой антифрикционного материала, составляют всего несколько процентов. При этом даже в самых тонких поверхностных слоях не найдено следов какого-либо элементопереноса с поверхности контртела, т.е. за счет обогащенного углеродом поверхностного слоя полностью исключено адгезионное взаимодействие трущихся тел (характерное для обычных механизмов изнашивания). Точное определение твердости такого поверхностного слоя не представляется возможным из-за его малости но, как показали результаты комплекса исследований [3], именно высокая твердость слоя обеспечивала устойчивость поверхности и его безыносность.

Необходимо отметить, что графит как твердый смазочный материал обеспечивает снижение сопротивления трению за счет легкого скольжения гексагональных слоев относительно друг друга при малых скоростях, но при возрастании скорости скольжения структурная картина поведения поверхностного слоя существенно усложняется [5].

При работе медных сплавов в условиях избирательного переноса [2], когда взаимодействие компонентов сплава со специально подобранной смазкой обеспечивает на контактирующей поверхности образование медной пленки, достигаются малые значения коэффициента трения и износа в широком диапазоне скоростей и нагрузок. Результаты структурных исследований медной пленки, появляющейся на контактирующей поверхности, показана

ли [2], что уже после небольшого времени испытаний период кристаллической решетки сильно уменьшается (до 0.354–0.357 при теоретическом 0.362 nm). Это объясняется возникновением в процессе трения упругих напряжений сжатия и появления вакансий. Наличие на поверхности исследуемых образцов кристаллов размером 0.1  $\mu\text{m}$  и более, а также отсутствие их предпочтительной ориентации указывает на рекристаллизационные процессы в тонком поверхностном слое. Кроме того, в зоне трения меди со сталью пленка содержит минимальное число структурных несовершенств дислокационной природы и обладает высокой плотностью точечных дефектов типа вакансий. В результате в работе [2] был сделан вывод, что материал тонких поверхностных слоев находится в состоянии, подобном расплавленному, что обеспечивает легкое взаимное перемещение контактирующих поверхностей и малые значения коэффициента трения и износа.

В антифрикционных сплавах алюминий–свинец, алюминий–олово эффект безызносного трения достигается при сравнительно малых скоростях скольжения (1–5 m/s) [6]. Исследования структуры образующихся при трении тонких поверхностных слоев этих сплавов показали [7], что в результате интенсивной пластической деформации приповерхностных слоев мягкие структурные составляющие экструдируются на контактирующую поверхность и „размазываются“ по ней, обеспечивая сплошное покрытие. Этот процесс сопровождается интенсивной фрагментацией и формированием мелкодисперсной структуры. В отличие от медной пленки исследуемые покрытия из свинца и олова имели включения окислов, снижающие пластичность этого покрытия. Как было показано в [4], при создании инертной среды в зоне трения после определенной выдержки окисные включения удалялись, пластичность слоя приобретала соответствующее значение, и интенсивность изнашивания снижалась на один порядок и более, что свидетельствовало о полноценном проявлении эффекта безызносного трения.

Таким образом, как общие структурные признаки, так и особенности структурных изменений при формировании поверхностных слоев из углерода, меди, свинца (олова) свидетельствуют о протекании больших пластических деформаций при проявлении эффекта безызносного трения.

Показателен пример, приведенный в [2], когда деформация слоев металла, близких к поверхности трения, при удельной нагрузке в 1.5 МПа превышала 25%. Для достижения деформации такого уровня при статической нагрузке необходимо довести ее до 600–700 МПа (т. е. увеличить в 400 раз и более). Поэтому при анализе структурной приспособляемости материала к условиям термомеханического воздействия при трении скольжения необходимо учитывать динамическое состояние поверхностного слоя под воздействием больших пластических деформаций в течение длительного времени без разрушения.

## Анализ динамического состояния поверхностного слоя при безызносном трении с учетом больших пластических деформаций

Следуя последовательности эволюционного развития дефектных структур при больших пластических деформациях [8], полную картину структурных изменений в поверхностном слое при безызносном трении необходимо представить в следующем виде. С увеличением степени деформации в поверхностном слое должна нарастать плотность дислокаций. Соответственно уменьшается расстояние между ними, увеличивается среднее значение силы междислокационного взаимодействия. При непрерывном деформировании поверхностного слоя наступает ситуация, когда создается ансамбль сильно взаимодействующих дислокаций, для которого существенными становятся коллективные эффекты, обеспечивающие развитую пластическую деформацию. Коллективные моды эволюции дислокационного ансамбля должны вызвать в поверхностном слое не только трансляционные сдвиги, но и пластические развороты. Отличительной чертой наблюдаемых дефектов является то, что они составлены не просто из дислокационных ансамблей, а из оборванных дислокационных границ. Основной закономерностью эволюции дефектных структур в поверхностном слое на достигаемой стадии развития пластической деформации должна стать пространственная неоднородность и локализация последней.

В условиях сильной локализации деформации необходимо учитывать проявление в поверхностном слое сдвиговой неустойчивости, что соответствует общим представлениям о появлении в сильных полях внешних воздействий локальных сдвигоустойчивых возбужденных состояний [9]. Эти состояния находятся в динамическом равновесии с окружающей их кристаллической средой и играют в поведении кристаллов основную роль. Фактически материал поверхностного слоя должен переходить в состояние, подобное двухфазному, когда в нем возникают области с высокой концентрацией дефектов структуры, чередующиеся с областями малоискаженной кристаллической фазы и находящиеся с ними в динамическом равновесии. Такое двухфазное равновесие термодинамически выгоднее, чем однородно искаженный кристалл.

Представления о двухфазном состоянии поверхностного слоя с учетом физической модели пластичности превращения [10] позволяют объяснить наблюдаемое при безызносном трении резкое снижение сопротивления пластическому деформированию. В условиях появляющейся сдвиговой неустойчивости направленное механическое воздействие способствует образованию зародышей некоторых предпочтительных ориентаций и обеспечивается накопление макроскопической деформации в сторону приложенного напряжения. Когда к

материалу приложены сдвиговые напряжения, для явления пластичности превращения характерна пропорциональность скорости пластической деформации и напряжения [11]. Наблюдаемое в рассматриваемом нами случае безыносного трения снижение сопротивления пластическому деформированию является следствием того, что превращение осуществляется за счет сил термодинамического характера, а его макроскопическое проявление обусловлено возмущающим влиянием напряжений на выбор благоприятных ориентационных вариантов.

При существенно неоднородном напряженном состоянии материала поверхностного слоя принципиально важное значение имеют условия обеспечения стационарного режима деформации и динамической устойчивости постоянно преобразующейся структуры этого слоя. Термодинамический анализ процесса пластической деформации с позиций изменения условий диссипации энергии показывает, что скорость процесса следует рассматривать как сумму двух составляющих, связанных с деформационным упрочнением при дефектообразовании и динамическим возвратом (релаксацией) [12]. В таких условиях пропорциональность скорости пластической деформации и напряжения, присущая явлению пластичности превращения, и динамическая устойчивость структуры двухфазного слоя могут быть достигнуты лишь при

$$\dot{i}_e = \dot{q}, \quad (1)$$

где  $\dot{i}_e$  — скорость накопления внутренней энергии,  $\dot{q}$  — скорость релаксационного процесса, т.е. когда при определенной интенсивности деформационных процессов скорость релаксации деформированных объемов становится когерентной (самосогласованной) со скоростью накопления различного рода дефектов.

Накопленный к настоящему времени огромный экспериментальный материал по структурным исследованиям эффекта безыносного трения не дает возможности оценить самосогласованный характер взаимодействия процессов образования дефектной фазы и релаксации возбужденных атомов в узлы кристаллической решетки, так как процессы на атомном уровне остаются вне поля зрения реального эксперимента. На атомарных моделях методом молекулярной динамики это вполне достижимо. Моделирование стационарного режима деформации на мезоскопическом уровне [13] показало, что такой режим связан с формированием устойчивых вихрей упругих деформаций, которые движутся в направлении распространения фронта возмущений. Но оценка взаимосвязи (когерентности) процессов взаимодействия дефектной и кристаллической фаз в поверхностном слое при безыносном трении может быть осуществлена только моделированием на микроскопическом (атомарном уровне).

## Исследование микромеханизма формирования двухфазной структуры поверхностного слоя при безыносном трении методом молекулярной динамики

Моделирование больших пластических деформаций на объемноцентрированных (ОЦК) и гранецентрированных (ГЦК) кристаллах проведено в [14], где межатомное взаимодействие оценивали псевдопотенциалом, рассчитанным по схеме Хейне–Абаренкова–Анималу с функцией экранирования Шоу. Такая схема позволяла детально оценивать формирование дефектной структуры рассматриваемых сплавов даже при наличии небольшого содержания неметаллических примесей. Но в этих модельных экспериментах деформацию осуществляли поэтапно с периодическим доведением системы до равновесного состояния. Это не позволяет оценивать случай сильноравновесной системы, в которой одновременно протекают процессы формирования кристаллической решетки и ее разрушения с образованием дефектной фазы.

Структурная эволюция пластичных материалов при трении скольжения исследована в [15], где на основе сравнения результатов реальных экспериментов и моделирования на атомных структурах проведен анализ формирования поверхностных слоев материалов. Во всех случаях отмечено формирование поверхностного слоя, по составу и структуре отличного от основного материала с ярко выраженной границей раздела между ними. Образующиеся структуры находились в устойчивом неравновесном состоянии. Проведенное молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия некоторых материалов при трении скольжения (Cu/Cu, Ta/Al, Cu/Ag) с использованием короткодействующего потенциала Ленарда–Джонса (ПЛД) показало наличие максимума и последующее значительное (на порядок) снижение зависимости силы трения от скорости скольжения. Но в рассматриваемом случае проводилось моделирование фрикционного взаимодействия материалов, а детально процесс формирования поверхностного слоя не изучался.

Молекулярно-динамические исследования деформирования кристаллов в [16] проводились на двумерной ангармонической модели твердого тела с потенциалом взаимодействия Ленарда–Джонса. При этом был использован алгоритм, реализующий идею кристаллизации твердого тела из расплава [17]. Такой подход при рассмотрении формирования двухфазной структуры поверхностного слоя при трении скольжения создает условия для обеспечения взаимодействия процессов разрушения кристаллической решетки с образованием дефектной фазы и обратного релаксационного с формированием кристаллической фазы. Для усиления эффекта короткодействия, как и в [16,17], нами использовался

Материал поверхностного слоя	Структура двумерной решетки	Межатомное расстояние, nm	Потенциал ионизации, eV	Сдвиговое усилие, N	Соотношение кристаллической и дефектной фаз
Углерод	Гексагональная	0.154	7.38	460	$\approx 1/9$ рис. 1, <i>b</i>
Медь	Треугольная	0.256	3.31	200	$\approx 1/5$ рис. 2, <i>b</i>
Свинец	Треугольная	0.350	2.05	130	$\approx 1/3$ рис. 3, <i>b</i>

модифицированный ПЛД:

$$u(r) = D \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right] k(r), \quad (2)$$

где  $a$  — равновесное межатомное расстояние,  $D$  — потенциал ионизации атома,  $r$  — расстояние между атомами,  $k(r)$  — корректирующий множитель, определяемый отношениями

$$k(r) = 1 \quad \text{при} \quad r \leq r_1;$$

$$k(r) = \left[ 1 - \left( \frac{r - r_1}{r_2 - r_1} \right)^2 \right] \quad \text{при} \quad r_1 < r < r_2;$$

$$k(r) = 0 \quad \text{при} \quad r \geq r_2.$$

Параметры  $r_1$  и  $r_2$  выбирались таким образом, чтобы величина  $r_1$  была близка к  $r_{\max} = 1.1087$  (в единицах  $a$ ), при котором ПЛД имеет точку перегиба и характеризуется максимальной силой взаимодействия, а радиус обрезания потенциала  $r_2$  несколько меньше радиуса второй координационной сферы в плотноупакованной треугольной решетке. Этим условиям удовлетворяют параметры  $r_1 = 1.1$  и  $r_2 = 1.7$  (в ед.  $a$ ).

В отличие от [16,17] (с учетом того, что необходимо было оценивать и сравнивать молекулярно-динамическое поведение поверхностных слоев из углерода, меди и свинца), расчеты велись в размерных единицах. Потенциал ионизации и межатомное расстояние для углерода, меди и свинца взяты из [18,19]. Сдвиговое воздействие на атомы поверхностного слоя оценивалось в ньютонах. Исходные структуры получали следующим образом. На выбранной площади поликристалла случайным образом задавалось положение определенного количества центров кристаллизации. Их положения фиксировались и вокруг них осуществлялся по заданной программе рост кристаллитов навстречу друг другу до взаимного контакта. При этом учитывалось, что для меди и свинца (имеющих структуру гранецентрированного куба) в двумерном изображении вокруг одного атома должны располагаться шесть соседних атомов. А для углерода, в двумерном изображении имеющего гексагональную решетку, вокруг одного атома должны располагаться три соседних атома с учетом направленности связи под углом  $120^\circ$ . Расчеты межатомного взаимодействия велись по алгоритму Верле в скоростной форме [20]. Интегрирование проводилось

с шагом  $1 \cdot 10^{-16}$  s, что гарантировало высокую точность численных расчетов. Для исключения краевых эффектов поверхностный слой по длине взят бесконечным.

Эксперименты проводились по следующей схеме. Задавалась необходимая для выбранного материала величина потенциала ионизации и затем под него подбиралось такое сдвиговое напряжение, которое обеспечивало устойчивую динамическую структуру поверхностного слоя. Это можно было визуально оценить по структуре материала на экране монитора. Когда сдвиговое напряжение было мало, исходная поликристаллическая структура переходила в монокристаллическую. В случае же превышения сдвиговым напряжением определенного предела двухфазный дефектно-кристаллический поверхностный слой наполнялся пустотами, которые быстро росли и приводили к разрушению поверхностного слоя. При достижении динамического равновесия между действием межатомного потенциала и сдвигового напряжения устанавливалась устойчивая картина поверхностного слоя, которая в отдельных деталях могла со временем меняться, но по общему соотношению кристаллической и дефектной фаз была стабильна.

Результаты модельных экспериментов представлены в таблице.

На рис. 1, *a*, 2, *a* и 3, *a* показаны исходные структуры углерода, меди и свинца. Структуры после достижения устойчивого состояния представлены на рис. 1, *b*, 2, *b*, 3, *b*. Они отражают дефектное состояние материала в динамических условиях одновременного противодействия внешнего сдвигового усилия и сил межатомной связи. Эти дефектные структуры не могут отождествляться со статическими дефектными структурами реальных образцов материала, получаемыми при структурном анализе после завершения процесса трения. Полученные результаты однозначно свидетельствуют о том, что с возрастанием энергии межатомной связи материала поверхностного слоя растет и величина внешнего воздействия, при котором получается устойчивая двухфазная структура, характеризующая проявление эффекта безыносного трения. Кроме того, самопроизвольное формирование структуры поверхностного слоя в рассматриваемых условиях не только для меди, что было отмечено ранее как избирательный перенос, но и для углерода и свинца позволяют считать, что и в этом случае мы имеем дело с явлением избирательного переноса, характеризующим термодинамическое поведение системы.

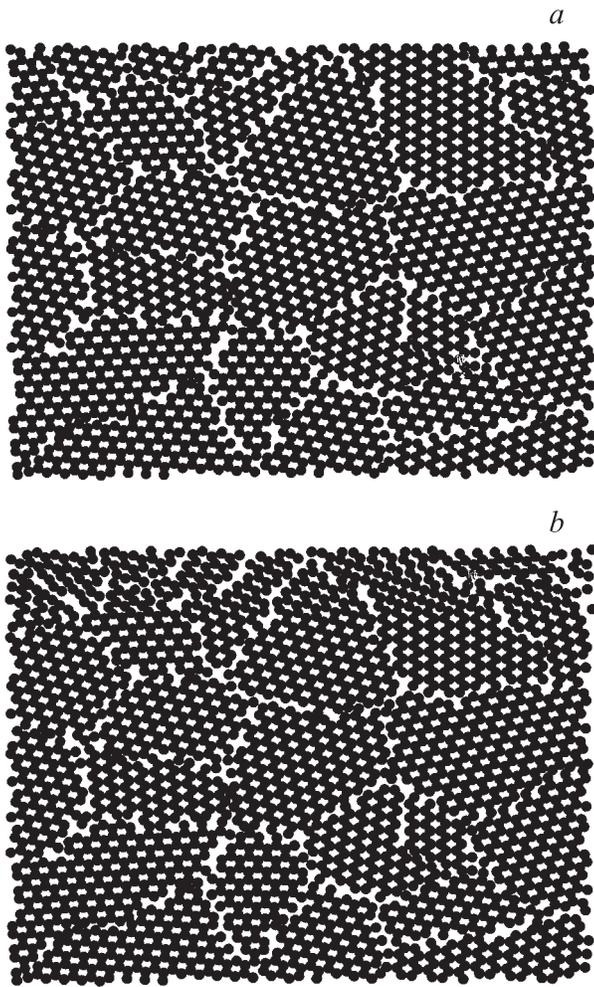


Рис. 1. Атомная структура поверхностного слоя для углерода.

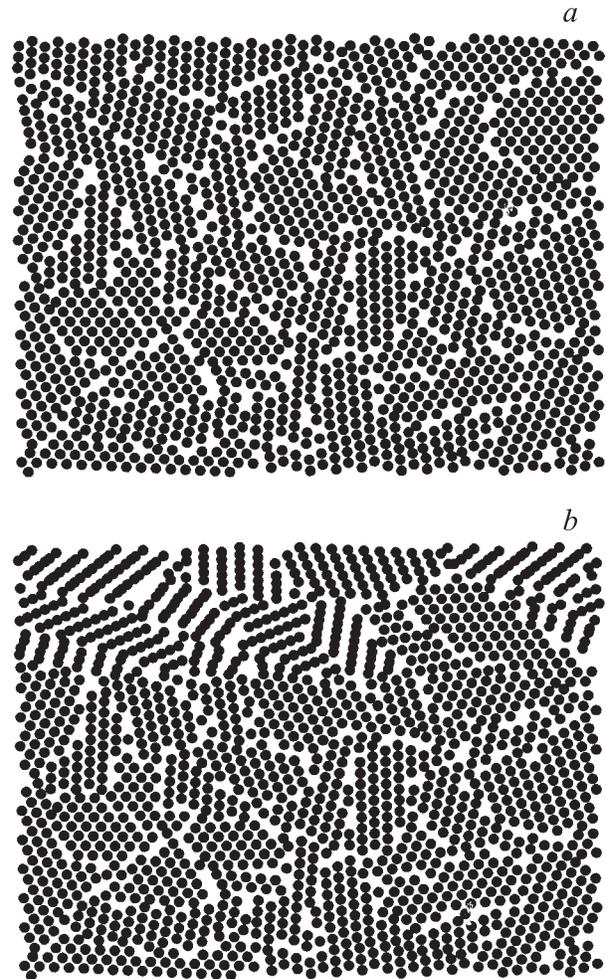


Рис. 2. Атомная структура поверхностного слоя для меди.

Движение рассматриваемой нами микросистемы определяется силами, действующими между ее атомами, начальными условиями и воздействием внешней среды, определяемым сдвиговым напряжением. Однако результат действия сдвигового напряжения на отдельный атом совершенно неадекватен реальному проявлению системы в данный момент на макроуровне. Как показано в [21], в соответствии с идеями Гиббса рассматриваемую макросистему необходимо ассоциировать с целым ансамблем эквивалентных микросистем. Тогда закономерности развития макросистемы будут выводиться из среднего поведения этого ансамбля, т.е. статистически.

Основная закономерность, определяющая стабильность существования двухфазной структуры в поверхностном слое и макроэффект безыносного трения, характеризуется когерентностью прямого процесса появления дефектной фазы и обратного процесса, обеспечивающего возрождение кристаллической фазы. Механизм проявления этой закономерности можно проследить на примере рассмотрения ансамбля эквивалентных микро-

систем. Наличие взаимодействия между атомами приводит к возникновению корреляции между этими частицами. В этом решающую роль играют мелкомасштабные флуктуации. Как показано в [22] на примере классической динамической системы (неравновесный идеальный газ), мелкомасштабные флуктуации „участвуют“ в формировании необратимого процесса, обеспечивая диссипацию энергии. Решение уравнения эволюции этой системы приводит к выражению, называемому интервалом столкновений, которое целиком описывает необратимый (релаксационный) процесс преобразования упорядоченного движения, создаваемого внешним воздействием, в хаотическое тепловое движение частиц.

В рассматриваемом нами случае необратимого процесса в динамической системе, образующейся в поверхностном слое при эффекте безыносного трения, роль мелкомасштабных флуктуаций необходимо оценивать посредством вариационных принципов термодинамики, которые также позволяют описать необратимый процесс преобразования внешнего воздействия в хаотическое, тепловое движение атомов.

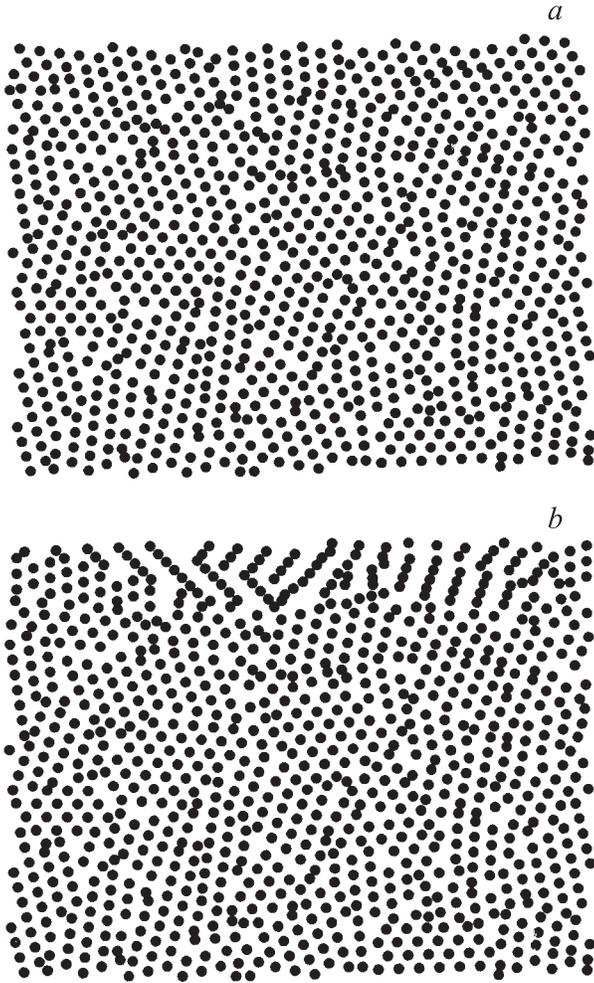


Рис. 3. Атомная структура поверхностного слоя для свинца.

### Термодинамическая оценка поведения системы в процессе проявления эффекта безызносного трения

Для анализа рассматриваемого нами процесса трения скольжения с реализацией явления безызносности и самопроизвольным возникновением однокомпонентного поверхностного слоя может быть выведено неизоэнтальпическое уравнение переноса на основе интегрального вариационного принципа термодинамики [23]. Запись плотности лагранжиана для интегрального принципа в общем виде

$$Z = \sigma - \psi$$

( $\sigma$  — кинетическая часть, отражающая скорость возрастания энтропии в единице объема, а  $\psi$  — потенциальная составляющая, определяемая потенциалом рассеяния) показывает, что в единичном объеме интегральный принцип суммирует действие принципа наименьшего рассеяния Онсагера и принципа минимального производства энтропии Пригожина. Однако интегральный принцип является независимым вариационным принципом и лишь

на его основе непосредственно выводятся дифференциальные уравнения, описывающие процессы переноса.

Уравнение для переноса энергии в неизотермических и многокомпонентных континуумах под воздействием внешней произвольной силы в универсальном  $\Gamma$ -представлении имеет вид [23]:

$$\rho \dot{u} + \rho p \dot{v} - \sum_{k=1}^k h_{qk} \nabla \Gamma_1 F_k - \sum_{i,k=1}^k L_{ik} (\Gamma_q F_i + \nabla \Gamma_i) F_k + \nabla \left[ L_{qq} \nabla \Gamma_q + \sum_{k=1}^k L_{qk} (\Gamma_1 F_k + \nabla \Gamma_k) \right] = 0. \quad (3)$$

В уравнении (3)  $\rho$  — плотность;  $\dot{u}$  — скорость изменения внутренней энергии;  $p$  — давление;  $\dot{v}$  — скорость изменения объема;  $L_{qk}, L_{ik}, L_{qq}$  — коэффициенты, учитывающие зависимость потока от термодинамической силы;  $\nabla$  — оператор набла;  $\Gamma_q, \Gamma_k, \Gamma_i$  — термодинамическая сила в  $\Gamma$ -представлении;  $F_k, F_i$  — внешняя сила.

Если учесть, что в процессах, происходящих в поверхностном слое при безызносном трении, изменения объема незначительны ( $\dot{v} \approx 0$ ), то уравнение (3) с учетом  $\nabla \Gamma_q \equiv X_q, \Gamma_q F_k + \nabla \Gamma_k \equiv X_k, \Gamma_q F_i + \nabla \Gamma_i \equiv X_i$  можно выразить следующим образом:

$$\rho \dot{u} = \sum_{k=1}^k L_{qk} X_q F_k + \sum_{i,k=1}^k L_{ik} X_i F_k - \nabla \left[ L_{qq} X_q + \sum_{k=1}^k L_{qk} X_k \right]. \quad (4)$$

Выражение (4) показывает, что изменение удельной внутренней энергии рассматриваемого объема поверхностного слоя происходит двояко. Во-первых, силы внешнего воздействия ( $F_k$ ) обеспечивают возрастание удельной внутренней энергии за счет протекания процесса дефектообразования и формирования дефектной фазы. Во-вторых, за счет действия межатомных сил ( $X_q, X_k$ ) протекают релаксационные процессы возрождения кристаллической фазы с понижением удельной внутренней энергии.

Процесс переноса компонентов на основе интегрального принципа определяется следующим уравнением [23]:

$$\rho \dot{c}_i + \nabla \left[ L_{qi} \nabla \Gamma_q + \sum_{k=1}^k L_{ik} (\Gamma_q F_q + \nabla \Gamma_k) \right] = 0, \quad (5)$$

где  $c_i$  — скорость изменения концентрации рассматриваемого компонента,  $i = 1, 2, \dots, k$ . Преобразования, аналогичные проведенным с уравнением (3), приводят выражение (5) к следующему виду:

$$\rho \dot{c}_i = -\nabla \left( L_{qi} X_q + \sum_{k=1}^k L_{ik} X_k \right). \quad (6)$$

Выражения (5) и (6) показывают, что с возрастанием внешней силы  $F_k$  концентрация  $c_i$  понижается и может

достичь нуля. Остается только тот компонент, у которого внешняя сила становится равной силе межатомного взаимодействия, в итоге  $X_k = 0$  и концентрация  $c_i$  не снижается.

Если принять стопроцентную реализацию условия (1), то при достижении стационарного состояния можно считать, что внешнее воздействие полностью расходуется на формирование дефектной фазы, а релаксационный процесс в полной мере обеспечивает формирование кристаллической фазы. Тогда (на основе общего выражения для потока [23]) поток атомов основного компонента формируемого поверхностного слоя может быть оценен следующим образом:

$$J_i = \sum_{k=1}^k L_{ik} \left( \frac{F_k}{T} - \frac{\mu_k}{T} \right) = \frac{1}{T} \sum_{k=1}^k L_{ik} (F_k - \mu_k). \quad (7)$$

Выражение (7) уточняет механизм проявления зависимости (6). Когда внешняя сила, действующая на каждый атом ( $F_k$ ), равна силе межатомного взаимодействия ( $\mu_k$ ) для атомов, отличных от основного металла ( $\mu_i$ ), то поток атомов основного металла становится равным нулю ( $J_i = 0$ ).

Параболическая (квадратичная) зависимость диссипации энергии при формировании упорядоченных структур в поверхностном слое, полученная в работе [1], позволяет оценить рациональные пределы реализации эффекта безыносного трения для различных материалов. Каноническое уравнение параболы  $y^2 = 2px$  показывает, что чем меньше параметр параболы  $p$ , тем острее парабола и тем более четко должно проявляться избирательное накопление определенного компонента в поверхностном слое. Результаты модельных экспериментов с углеродом, медью и свинцом подтверждают это. По мере увеличения энергии межатомного взаимодействия от свинца к углероду заметно усиливалась четкость установления двухфазной структуры поверхностного слоя, что проявлялось в сужении интервала сдвиговых напряжений, при которых находилась получаемая структура. Когда же процесс установления устойчивой структуры поверхностного слоя происходит в антифрикционном сплаве, содержащем несколько компонентов, он будет определяться зависимостью (7) и будет тем более четким, чем большими будут значения  $F_k$  и  $\mu_k$ . Это связано с тем, что при одной и той же разности концентраций между основным и примесным компонентами разница ( $F_k - \mu_k$ ) будет тем больше, чем больше абсолютные значения  $F_k$  и  $\mu_k$ .

В реальных условиях, когда энергия межатомного взаимодействия основного материала (например, углерода) не строго соответствует сдвиговому напряжению, создаваемому внешней нагрузкой (например, скоростью скольжения 50 м/с), в поверхностном слое появляется дополнительный материал — медь (несколько процентов). При этом работает правило: чем выше химический потенциал основного компонента и соответственно чем больше  $F_k$ , тем круче парабола и тем меньше

атомы примесного компонента внедряются в основной материал поверхностного слоя. В случае же сближения химических потенциалов основного и примесного компонентов доля примесного компонента в поверхностном слое будет возрастать.

Рассмотренная картина позволяет поставить вопрос о прогнозировании эффекта безыносного трения в заданном диапазоне внешней нагрузки за счет подбора компонентов антифрикционного сплава с необходимой энергией межатомной связи.

## Выводы

1. Проявление эффекта безыносного трения в металлических сплавах связано с формированием поверхностного слоя из определенного материала, тип которого определяется интенсивностью внешнего воздействия.

2. Структура, образующаяся при безыносном трении поверхностного слоя, характеризуется наличием дефектной и кристаллической фаз, находящихся в динамическом взаимодействии. Устойчивость такого двухфазного поверхностного слоя обеспечивается когерентностью взаимного превращения фаз.

3. Экспериментальные результаты, полученные методом молекулярной динамики, подтверждают формирование двухфазной структуры в поверхностном слое при проявлении эффекта безыносного трения. Качественная оценка связи равновесного соотношения образующихся фаз с энергией межатомного взаимодействия позволяет сделать вывод о том, что чем прочнее материал поверхностного слоя, тем более динамичная структура формируется в поверхностном слое при безыносном трении.

4. При трении скольжения пластичных материалов превращение энергии внешнего воздействия в энергию теплового движения атомов обеспечивают мелкомасштабные флуктуации. Чем полнее протекает этот диссипативный процесс, тем полнее реализуется эффект безыносного трения.

5. В динамической системе при безыносном трении процессы переноса регламентируются вариационным интегральным принципом термодинамики.

6. В поверхностном слое материала при безыносном трении диссипативный процесс оценивается соотношением возрастания внутренней энергии при увеличении скорости формирования дефектной фазы и ее снижения при увеличении скорости обратного релаксационного процесса возрождения кристаллической фазы. Чем интенсивнее динамическое взаимодействие взаимосвязанных процессов, тем полнее протекает диссипативный процесс.

7. С возрастанием силы внешнего воздействия на поверхность трения антифрикционного материала концентрация компонентов сплава в поверхностном слое снижается. В поверхностном слое остается только тот

компонент, у которого сила межатомного взаимодействия может противодействовать силе внешнего воздействия, диссипируемой до атомного уровня.

8. Результаты проведенного исследования создают предпосылки для разработки антифрикционных сплавов, обеспечивающих эффект безыносного трения в требуемом диапазоне скоростей и нагрузок.

Авторы выражают благодарность А.Б. Синани и А.М. Кривцову за обстоятельное обсуждение и критические замечания.

## Список литературы

- [1] *Шахназаров Т.А., Тахтарова Ю.А.* // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2003. № 3. С. 70–75.
- [2] *Рыбакова Л.М., Куксенова Л.И.* Структура и износостойкость металла. М.: Машиностроение, 1982. 212 с.
- [3] *Булатов В.П., Кириенко О.Ф.* // Проблемы машиностроения и надежности машин. 1991. № 2. С. 56–61.
- [4] *Шахназаров Т.А., Тахтарова Ю.А.* // Письма в ЖТФ. 2002. Т. 28. Вып. 4. С. 7–11.
- [5] *Sokoloff J.B.* // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. N 1. P. 760–765.
- [6] *Шихамиров С.С., Шахназаров Т.А.* // Современные технологические методы повышения качества машин. Изд-во ДагНЦ РАН, 1992. С. 71–75.
- [7] *Маркова Т.Ф., Муктепавел Ф.О.* / Изв. АН Латв. ССР. Сер. Физ.-техн. наук. 1982. № 4. С. 65–70.
- [8] *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металла. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
- [9] *Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В.* Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
- [10] *Ермолаев В.А., Лихачев В.А.* // ФММ. 1983. Т. 55. Вып. 4. С. 693–700.
- [11] *Волков А.Е., Лихачев В.А., Николаев П.И.* // Изв. вузов. Физика. 1984. № 3. С. 65–68.
- [12] *Федоров В.В.* Кинетика повреждаемости и разрушения твердых тел. Изв. ФАН Узб. ССР, 1985. 249 с.
- [13] *Псахье С.Г., Смолин А.Ю., Шилко Е.В.* и др. // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 9. С. 34–37.
- [14] *Лобастов А.И., Шудегов В.Е., Чудинов В.Г.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. Вып. 12. С. 100–102.
- [15] *Rigney D.F., Fu X.Y., Hammerberg J.E.* et al. // Scripta Materials. 2003. Vol. 49. P. 977–983.
- [16] *Лагунов В.А., Синани А.Б.* // ФТТ. 2001. Т. 43. Вып. 4. С. 644–650.
- [17] *Лагунов В.А., Синани А.Б.* // ФТТ. 1996. Т. 38. Вып. 6. С. 1791–1798.
- [18] *Термодинамические свойства индивидуальных веществ.* М.: Наука, 1979.
- [19] *Регель В.Р., Слуцкер А.И., Томашевский Э.Е.* // УФН. 1972. Т. 106. Вып. 2. С. 193–228.
- [20] *Гулд Х., Тобочник Я.* Компьютерное моделирование в физике. Ч. 1. М.: Мир, 1990. 349 с.
- [21] *Циглер Г.* Экстремальные принципы термодинамики необратимых процессов и механика сплошной среды. М.: Мир, 1966. 135 с.
- [22] *Гуров К.П.* Феноменологическая термодинамика необратимых процессов. М.: Наука, 1978. 128 с.
- [23] *Дьярмати И.* Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. М.: Мир, 1974. 304 с.