

ОСОБЕННОСТИ ФРИКЦИОННОГО КОНТАКТА НА АТОМНОМ МАСШТАБЕ. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ*

А.И. ДМИТРИЕВ

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия

e-mail: dmitr@ispms.tsc.ru

А.Ю. НИКОНОВ

Томский государственный университет, Томск, Россия

С.Г. ПСАХЬЕ

С использованием метода молекулярной динамики проведено моделирование фрикционного контакта кристаллических тел на атомном масштабе. В качестве исследуемых объектов выбраны чистые металлы с ОЦК и ГЦК структурой. При моделировании варьировались следующие параметры: материалы контактирующих пар, степень сопряженности исходных поверхностей, условия нагружения и условия теплоотвода. Показано, что во всех случаях в области контакта формируется особый интерфейсный слой, структура которого отличается от структуры материала в объеме. Условия формирования интерфейсного слоя и его параметры определяются как материалами контактирующей пары, так и условиями нагружения. Выявленные закономерности формирования и развития интерфейсного слоя в условиях контактного взаимодействия могут быть полезными для понимания особенностей изменения структуры поверхности при контактной обработке материала, а также использованы в задачах разработки контролируемого интерфейса материалов с покрытиями.

Введение

Большое разнообразие реализующихся микромеханизмов взаимодействия в условиях фрикционного контакта и многоуровневая природа процессов трения и износа приводит к необходимости разработки новых инструментов как экспериментального, так и теоретического изучения, явно учитывающих особенности изучаемых явлений [1, 2, 3]. Это обуславливает значительный интерес развития, в том числе, вычислительных методов для изучения и анализа широкого спектра процессов, протекающих в поверхностных слоях твердого тела [3, 4, 5]. Результаты, полученные в ходе моделирования, позволяют лучше понять механизмы контактного взаимодействия, что дает возможность целенаправленного воздействия на структуру и состав поверхностных слоев фрикционных материалов с целью повышения и совершенствования их эксплуатационных характеристик. Поскольку трение и износ сопровождаются интенсивными процессами возникновения и накопления повреждений в контактной области, перемешиванием материала,

*Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных исследований Отделения энергетики, машиностроения и процессов управления РАН 13.13.3 и интеграционного проекта СО РАН №127 со сторонними организациями.

скалыванием и другими процессами, связанными с нарушением сплошности преимущественным представляется использование вычислительных методов, основанных на концепции частиц [5, 6]. Накопленный ранее авторами опыт по развитию и применению метода частиц для решения различных триботехнических задач на мезоскопических масштабах [7, 8, 9, 10] позволяет говорить об эффективности использования данного подхода. В частности, в работе [8] было показано формирование в пятне контакта «квазижидкого» слоя, структура в котором отличается от структуры в объеме обоих взаимодействующих тел. Структура и состав слоя существенно влияют на режим скольжения взаимодействующих тел и определяют макроскопические характеристики трения. Были предложены возможные способы понижения или повышения рассчитываемого значения коэффициента трения путем введения соответствующих включений в поверхностный слой материалов контактирующей пары [9], а также методы стабилизации заданного значения коэффициента трения в ходе всего процесса трения [10], что особенно важно с практической точки зрения. В настоящей работе нами была предпринята попытка проанализировать особенности развития процессов деформации и разрушения тонких поверхностных слоев, реализуемых в условиях фрикционного контакта на наноскопическом масштабе. Для этой цели был выбран метода частиц атомного масштаба – метод молекулярной динамики [11].

1. Влияние кристаллографической ориентации

Для расчетов в рамках метода молекулярной динамики был использован программный пакет LAMMPS [12], имеющий возможность проведения параллельных вычислений. Первоначально рассматривался фрикционный контакт двух кристаллических материалов со свойствами Cu и Al, атомные решетки которых были ориентированы так, что оси X Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям [100], [010] и [001] для кристаллита меди (рис. 1а). Ориентация решетки кристаллита алюминия варьировалась. В одних расчетах она была изначально повернута вокруг оси Z на угол $\theta \approx 60$ градусов, в других была сонаправлена с атомной решеткой кристаллита меди. Моделировалось относительное проскальзывание кристаллитов со скоростью от 20 до 50 м/с вдоль оси X путем задания дополнительных скоростей граничным атомам кристаллитов, внешним по отношению к плоскости контакта. Толщина нагружаемых слоев для каждого из зерен соответствовала двум радиусам обрезания потенциала межатомного взаимодействия ($R_{cut} = 0,501$ нм для меди), который описывался в рамках метода погруженного атома [13]. Выбор потенциала обусловлен возможностью с достаточно высокой степенью точности описывать упругие и поверхностные свойства, а также энергетические параметры дефектов данной системы. Уравнения движения интегрировались с шагом по времени $\Delta t = 0,001$ пс. Полное число атомов превышало 200000. В направлении осей X и Y моделировались периодические граничные условия, а в направлении Z нагрузка не задавалась. В расчетах менялись следующие характеристики контакта: условия нагружения, кристаллографические ориентации атомных решеток, угол относительной разориентировки атомных плоскостей в области контакта. Кроме того, путем варьирования профиля контактирующих поверхностей менялись условия сопряжения, реализуемые на контакте.

Согласно результатам молекулярно-динамического исследования особенности поведения кристаллических материалов сильно зависят от условий, реализуемых на контакте. В частности, в области трибологического контакта могут наблюдаться эффекты,

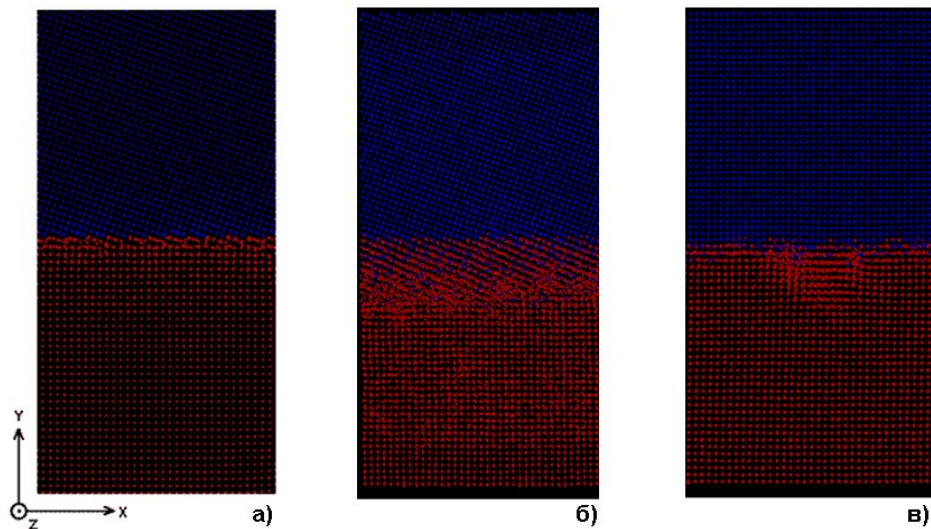


Рис. 1. а) Исходная структура взаимодействующих кристаллитов; б) и в) структура моделируемых кристаллитов после 500пс, отличающихся исходной взаимной ориентацией кристаллических решеток

связанные с нарушением кристаллического порядка взаимодействующих материалов. Это сопровождается формированием слоя, в котором протекает взаимная диффузия атомов, принадлежащих обоим кристаллитам (рис. 1б). Причем этот процесс является механически активируемым, что может существенно повышать его динамические характеристики. Подобно этому в условиях механической активации может происходить увеличение скорости, например, таких процессов, как окисление материалов пары трибосопряжения. Следует отметить, что косвенно этот результат был отмечен в работе [9], где на основе сравнения величин коэффициента трения для различных контактов был сделан вывод о скорости формирования оксидных пленок на поверхности чистых металлов. Сопоставляя результаты моделирования на различных масштабах, следует отметить также аналогию эффекта формирования слоя перемешивания с тем, что наблюдалось в [8, 9] на масштабе отдельных зерен нанокристаллических материалов, полученных с помощью моделирования методом подвижных клеточных автоматов. Это говорит о многомасштабности исследуемых процессов и об общности природы наблюдаемых явлений. Однако явный учет атомной структуры взаимодействующих материалов позволяет выявить и некоторые особенности поведения кристаллических материалов при их взаимодействии. В частности, в процессе такого взаимодействия возможно формирование разориентированной наноблочной структуры в области интерфейса, что хорошо видно на рис. 1в. Отдельные блоки представляют собой нанокристаллические зерна. Данные эффекты способствуют увеличению силы сопротивления относительного проскальзывания поверхностей контактирующих тел. Следует отметить, что формирование блоковой структуры отмечается экспериментально вблизи поверхности в условиях трибологического контакта. Результаты моделирования методом молекулярной динамики показывают, что в условиях стесненной сдвиговой деформации может происходить рост одного из контактирующих зерен нанокристаллического материала за счет структуры соседнего зерна. При этом перемещение межзеренной области определяется условиями нагружения. Кроме того, область контакта двух взаимодействующих тел может являться местом зарождения таких дефектов, как дислокации, дефекты упаков-

ки и др., которые распространяются из зоны интерфейса в объем материала (рис. 2). Пересечение многочисленных дислокаций может также привести к фрагментации материала.

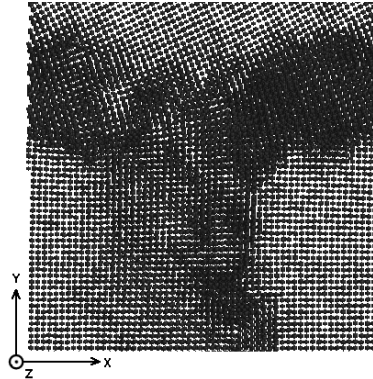


Рис. 2. Структура моделируемых кристаллитов после 450пс, характеризующаяся перемещением межзеренной границы с формированием дефектов структуры.

Несмотря на отмеченное разнообразие результатов компьютерного моделирования, полученных в рамках молекулярно динамического исследования, во всех рассмотренных случаях можно отметить, что происходит формирование интерфейсного слоя, имеющего отличный состав и структуру от структуры в объеме материала. Особенности данной слоя отмечались и ранее, но на другом масштабном уровне. Формирование интерфейсного слоя на атомном уровне меняет свойства поверхности взаимодействующих материалов, понижает энергетические барьеры формирования новых (в том числе метастабильных фаз) и инициирования химических реакций.

2. Учет влияния фрикционного нагрева

Очевидно, что интенсивные сдвиговые деформации, реализуемые в условиях контактного взаимодействия, могут приводить к существенному разогреву поверхностных слоев материалов пары трисопряжения. Поэтому следующим этапом изучения особенностей контактного взаимодействия на атомном масштабе являлся явный учет влияния термофрикционного воздействия на изменение физико-механических свойств и структуры поверхностных слоев контактирующих кристаллитов. В силу малости временных интервалов, рассматриваемых в рамках компьютерного моделирования, исследовался установившийся этап трения. Моделировалось взаимодействие модельных материалы со свойствами Cu и Ag, атомные решетки которых были ориентированы так, что оси X Y и Z соответствовали кристаллографическим направлениям [100], [010] и [001] для кристаллита меди (рис. 1а). Решетка кристаллита серебра была изначально повернута вокруг оси Z на угол $\theta=28$ градусов (рис. 3). Моделировалось относительное проскальзывание со скоростью 20 м/с вдоль оси X путем задания дополнительных скоростей граничным атомам кристаллитов, внешним по отношению к плоскости контакта. В направлении осей X и Y моделировались периодические граничные условия, а в направлении Z нагрузка не задавалась. При этом рассматривалось два варианта нагружения. В первом случае вся энергия, переданная системе за счет внешней сдвиговой деформации, перераспределялась внутри моделируемой пары. Во втором случае, со стороны

нагружаемых областей моделировался специальный слой атомов, в пределах которого дополнительно задавалась диссипация кинетической энергии, тем самым имитировался отвод тепла из области контакта во внутренние слои протяженных контактирующих материалов. Таким образом, первый вариант соответствует взаимодействию двух тонких пленок, а второй вариант можно рассматривать как локальный контакт двух объемных кристаллических материалов.

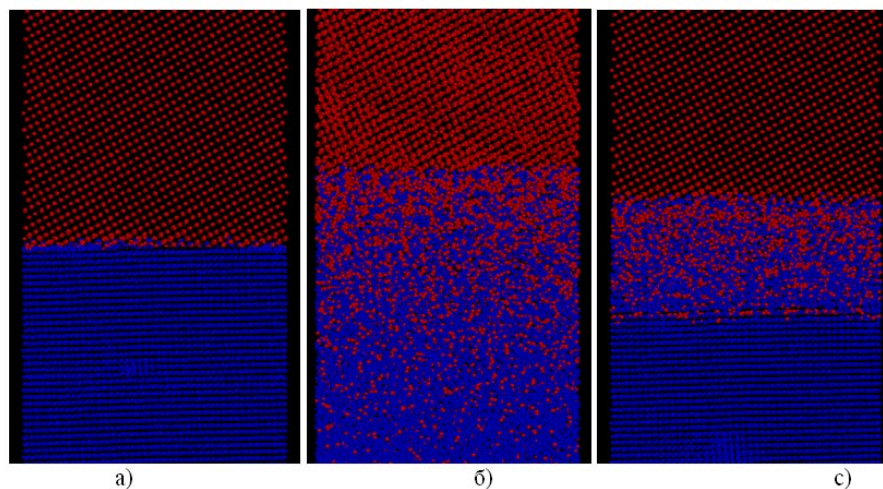


Рис. 3. Структура моделируемых кристаллитов: а) исходная, б) конечная для варианта без отвода тепла, в) конечная для варианта с отводом тепла.

Согласно полученным результатам поведение материалов в области контакта для рассматриваемых вариантов заметно отличается. В случае взаимодействия двух кристаллических тонких пленок произошел разогрев области контакта с достижением температуры плавления медного кристаллита. На рис. 3б хорошо видно нарушение порядка атомной решетки во всем моделируемом кристаллите. При этом более тугоплавкий материал сохранил кристаллическую структуру. Характерно, что относительное проскальзывание взаимодействующих материалов сопровождается перемешиванием атомов в зоне контакта с ярко выраженным градиентным характером внедрения атомов Ag в кристаллит меди практически на всю глубину моделируемого фрагмента. В случае моделирования контакта с отводом тепла происходит сохранение кристаллических решеток обоих взаимодействующих материалов при тех же прочих условиях нагружения, что и в первом варианте. При этом зона перемешивания атомов обоих веществ локализуется вблизи области контакта, а распределение атомов в области интерфейса носит равномерный характер. Результаты моделирования следует учитывать в различных практических приложениях, где определяющими являются механизмы контактного взаимодействия.

Выводы

Основные результаты работы можно сформулировать следующим образом. С помощью компьютерного моделирования выявлены некоторые особенности контактного взаимодействия, протекающие на уровне отдельных атомов. Показано, что в ходе относительного проскальзывания в области контакта формируется особый интерфейсный слой,

структура которого отличается от структуры материала в объеме. Условия формирования интерфейсного слоя и его параметры определяются различными факторами, например: материалами контактирующей пары, условиями нагружения, степенью разориентации атомных плоскостей, условиями сопряжения и др. Так, при определенных условиях атомы одного материала могут проникать в кристаллическую решетку другого материала, замещая в ней атомы основы. Поскольку этот процесс является механически активируемым, то скорость такой диффузии заметно выше традиционного процесса. Смена кристаллографической ориентации контактирующих кристаллитов существенно влияет на скорость процесса структурных изменений. Результаты настоящих исследований могут быть использованы для понимания процессов, определяющих прочностными свойствами интерфейсного слоя в материалах с покрытиями, а также для контроля свойств поверхностного слоя в контактных задачах.

Список литературы

- [1] ГОРЯЧЕВА И.Г. Механика фрикционного взаимодействия. М.: Наука, 2001. 478 с.
- [2] ПАНИН В.Е., ЕЛСУКОВА Т.Ф., ГРНИЯЕВ Ю.В. Механизм влияния величины зерна на сопротивление деформированию поликристаллов в концепции структурных уровней деформации твердых тел. Часть I. // Физ. Мезомех. 2003. Т. 6, №. 3. P. 63–74.
- [3] PERSSON B.N.J., BUCHER F., CHIAIA B. Elastic Contact Between Randomly Rough Surfaces: Comparison of Theory with Numerical Results // Phys. Rev. B. 2002. – V. 65. – No. 18. – P. 184106/1–184106/7.
- [4] IORDANOFF I., BERTHIER Y. First steps for a rheological model for the solid third body. // Tribology Series 36 (1999) 551-559.
- [5] КРИВЦОВ А.М., ВОЛКОВЕЦ И.Б., ТКАЧЕВ П.В., ЦАПЛИН В.А. Применение метода динамики частиц для описания высокоскоростного разрушения твердых тел // Тр. всерос. конф. «Математика, Механика и Информатика 2002».
- [6] OSTERMEYER G.P. The mesoscopic particle approach. // Tribol.Intern. 40 (2007) 953-959.
- [7] DMITRIEV A.I., OESTERLE W. Modeling of brake pad-disc interface with emphasis to dynamics and deformation of structures. // Trib. Int. 2010. V. 43, Is. 4. P. 719–727.
- [8] ПОПОВ V.L., ПСАХИЕ S.G., ШИЛКО E.V., DMITRIEV A.I. Quasi-fluid nano-layers at the interface between rubbing bodies: simulation by movable cellular automata // Wear. 2003. V. 254, No. 9. P. 901–906.
- [9] DMITRIEV, A.I., OESTERLE, W., KLOSS, H. Numerical simulation of typical contact situations of brake friction materials. // Tribology International 41 (2008) 1-8.
- [10] DMITRIEV A.I., OESTERLE W., KLOSS H. Numerical simulation of mechanically mixed layer formation at local contacts of an automotive brake system. / Tribology Transactions 51 (2008) 810-816.
- [11] Гулд Х. Тобочник Я. Компьютерное моделирование в физике. М.: Мир, 1990. ч. 1 350 с.
- [12] PLIMPTON, S.J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. No. 1. P. 1–19.
- [13] FOILES S.M. Embedded-atom and related methods for modeling metallic systems // MRS Bull 1996. V. 21. No. 2. P. 24–28.