

金属晶体间微观滑动摩擦特性的分子动力学模拟^{*}

肖乾, 穆明, 周新建

(华东交通大学 载运工具与装备教育部重点实验室, 南昌 330013)

摘要: 根据独立振子模型的能量耗散机理, 以光滑干摩擦接触平面为对象, 利用金属晶体的强体积效应特征, 构造了简化计算的界面势能模型, 分析了在界面摩擦状态下能量非连续耗散过程, 建立了简化计算滑动摩擦力与摩擦因数模型。从瞬间原子位置图和系统能量方面, 进行计算模拟和试验对比验证, 结果表明: 当接触界面势能处在某个谷底时, 滑块受静摩擦力, 界面间发生相对运动, 滑块变为受滑动摩擦力作用; 摩擦力按基本不变的斜率增加到某一值后突然降低, 而后变化呈现一定的周期性; 随着滑动的逐渐进行, 运动体与基体表面的温度逐渐增加而后趋于稳定, 两表面存在温度差; 滑动后界面平均接触压力明显下降, 而后趋于平缓。

关键词: 分子动力学; 界面势能; 滑动摩擦; 能量耗散

中图分类号: TH17.1

文献标识码: A

文章编号: 1007-9289(2011)06-0078-05

Molecular Dynamics Simulation of Sliding Friction Characteristics Between Micro Metal Crystals

XIAO Qian, MU Ming, ZHOU Xin-jian

(Key Laboratory of Ministry of Education for Conveyance and Equipment, East China Jiaotong University, Nanchang 330013)

Abstract: The contact interface potential model was constructed based on energy dissipation mechanism of independent oscillator model and the strong volume effect of metal crystals and the non-continuous energy dissipation process in the interface friction state was analyzed. A sliding friction coefficient calculation model on smooth dry friction contact plane was proposed. Experiments was also carried out to validate the procedures on the instant atomic locations and system energy. The results indicated that static friction force applied to the surface before contact interface overcome potential barrier. Sliding friction force raised after interface potential over certain value to initiate sliding. Simultaneously, the friction force increased linearly to a certain value, then dropped abruptly in the process. It was found that the temperature of both the moving surface and the substrate surface increased gradually to a stable state with the sliding. However, there was a temperature difference between two surfaces. The average interface contact pressure was found to decrease significantly after the sliding initiated and became stable with the sliding proceeded.

Key words: molecular dynamics; interface potential energy; sliding friction; energy dissipation

0 引言

关于界面摩擦的起源存在不同的理论解释, 如独立振子模型, 鹅卵石模型和断裂力学模型等, Tomlinson^[1]模型认为, 表明相对运动中的范德华作用使界面原子发生位移而偏移其初始位置, 但仍处于热力学的平衡状态(准稳态); 界面原子的应变能随着位移量增加而积累, 同时其平衡态的稳定性逐渐下降并最终达到一个失稳临界

状态, 此时原子由原来的平衡态跳向另一个能量更低的准稳态, 积累的应变能突然释放, 并伴随着剧烈的原子或晶格振动, 振动的能量通过声子发射最终转化为热能。J. N. Israelachvili^[2]把摩擦中界面原子的行为比喻为一辆小车在铺满鹅卵石的地上滚动, 车轮在爬上鹅卵石顶部时做功, 而从顶部下行时由于不可避免地碰撞而发生能量耗散。Homola^[3]等将界面分子膜构建成鹅卵石模型进行摩擦研究, 然后通过表面能来计算摩擦力。

文中以光滑干摩擦接触平面为对象, 根据 Tomlinson^[1]独立振子模型的能量耗散机理, 构造了滑动摩擦力的界面势能模型, 分析了在界面摩擦状态下能量非连续耗散过程, 建立了简化条

收稿日期: 2011-08-23; 修回日期: 2011-11-03

基金项目: * 国家自然科学基金(51005075); 江西省自然科学基金(2010GQC0034)

作者简介: 肖乾(1977—), 男(汉), 湖南常德人, 副教授, 博士。

件下滑动摩擦力计算模型,对丰富摩擦学的理论知识,在原子分子尺度上研究金属晶体间的力学行为和界面金属分子层的摩擦将起到借鉴和引导作用。

1 计算滑动摩擦力的原理

两个接触的物体并不是完全重合接触,微观中只有表面间凸起部分才相互接触,真实接触面积只占表观接触面积(即测定的试样面积)很小的一部分。摩擦力的数值为实际接触面积的正比函数,理论上实际接触面积与表面受到的法向载荷成正比,因此摩擦力数值与法向载荷成正比。

文中根据 Tomlinson 提出的独立振子模型,进行能量耗散机理计算。在该模型中,由于光滑干摩擦接触,界面原子会在局部势能最高点处失稳跳跃激发震荡,界面势能不可逆的转化为耗散能(热能),缓慢滑动中,假设系统势能变化全部转化为分子热运动(即分子动能)。因此由计算滑动过程中摩擦系统势能变化来计算摩擦力和摩擦因数。为简化分析,在模型建立中,一方面不考虑系统的边界条件,并假设摩擦系统为理想绝热系统,另一方面只考虑摩擦界面原子在周期势场作用下因受迫振动导致的能态变化,忽略相邻原子之间相互作用及原子的自激振荡对能量耗散的影响^[4]。

利用分子动力学原理计算微观摩擦系统势能的变化,摩擦系统中的弹性形变能相对于界面分子势能小得多,在计算公式中可以忽略不计,所以简化计算时只考虑摩擦界面中分子势能的变化,即文中接触界面势能变化。计算滑动时接触界面势能变化是根据鹅卵石模型来分析滑动过程界面间距的变化,然后利用界面粘附能量函数,由势能变化计算得到摩擦力。

2 分子动力学模拟

2.1 模型建立

从微观角度来看,摩擦力实际包含力和能量两个方面的作用。文中以光滑干摩擦接触平面为研究对象,研究两相同金属表面的微观滑动摩擦行为,并且以铝单晶组成的摩擦副为例来计算模拟,因为同种金属构成的摩擦副表面特性具有相对性,金属晶体具有很强的体积依赖特性,表面弛豫程度较小,可以将其看作密集堆积的刚性

小球^[5]。
由图 1 可知,金属晶体间滑动摩擦模型由基体和滑块组成。光滑接触面由三种原子类型组成:牛顿层原子,恒温层原子和周期性边界层原子。牛顿层原子运动可通过牛顿力学方程来解释;恒温层的设置起到及时将摩擦过程中产生的热量传导出去的作用,为保持该区域温度恒定需要将该层原子标度;周期性边界层的设置是假定系统周围被相同的镜像系统所包围,将一个有限的原子系统向周围做周期性扩展。

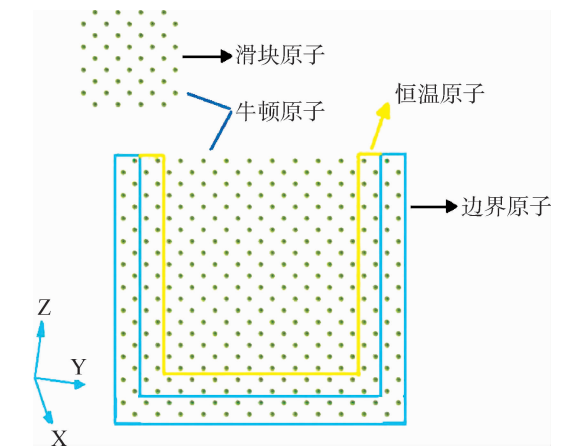


图 1 三维分子动力学模型示意图
Fig. 1 The sketch map of three-dimensional molecular dynamics model

恒温层和牛顿层原子的运动遵守牛顿运动定律。初始温度为 293 K,每隔一定分子动力学步数,调整恒温层原子速度,使恒温层平均温度保持在 293 K。由于固定边界不仅有分子间的相互作用,还引入了壁面的作用,可对粒子系统的空间大小和边界位置进行约束,所以边界层设置为周期性边界,并沿基体 Z 向施加周期边界条件,模拟条件各参数见表 1。

表 1 分子动力学模拟计算参数				
Table 1 Molecular dynamics simulation parameters				
基体、滑块材料	步数	系统初始温度/K	晶向和摩擦方向	计算步长
FCC(铝)	50 000	293	(001)晶面 (010)晶向	0.04
势函数	滑块尺寸	基体尺寸	滑块速度/ ($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)	系统
EAM(原子嵌入势)	30 nm×30 nm×15 nm	10 nm×10 nm×3 nm	30	NVT

2.2 势函数

Divesh Bhatt 等^[5]运用 EAM 势函数计算模拟获得与试验数据吻合良好的铝单晶气液共存曲线。Min kyu Yeo 等^[6]也在 EAM 势函数的基础上用分子动力学模拟铝纳米粒子的滑动。Zhang、L i 等^[7]使用嵌入原子势(EAM)模型对单纯的铝金属之间和 Al_2O_3 之间的摩擦行为进行了研究。文中铝单晶滑动摩擦的分子动力学研究采用 EAM 势函数。

EAM 理论认为由 N 个同种原子组成的纯金属,若忽略表面效应可以认为每个原子的能量相同,晶体的总能量如式(1)所示。

$$E = N \times E_i \quad (1)$$

其中 E_i 表示第 i 个原子对总能量的贡献,可以进一步表示为:

$$E = F(\rho) + \frac{1}{2} \sum_m N_m \varphi(r_m) \quad (2)$$

其中 $\rho = \sum_m N_m f(r_m)$; E 为每个原子的能量; N_m 为某一原子的第 m 近邻的原子数; r_m 为某一原子与第 m 近邻原子间的距离; $f(r_m)$ 为位于第 m 近邻的一个原子在某一原子处所产生的电子密度, $\varphi(r_m)$ 反映了原子间的排斥作用, $F(\rho)$ 为依赖于电子云密度的镶嵌能。

势函数确定以后,原子 i, j 之间的作用力就可以通过势函数对 r_{ij} 求导得出,如式(3)所示。

$$F_{ij} = - \frac{dE(r_{ij})}{dr_{ij}} \quad (3)$$

$E(r_{ij})$ 为原子 i 与原子 j 之间的势函数。作用在第 i 原子上的总原子力等于其周围所有原子对该原子作用力的合力,如式(4)所示。

$$F_i = \sum_j F_{ij} = \sum_j - \frac{dE(r_{ij})}{dr_{ij}} \quad (4)$$

2.3 求解运动方程数值算法

分子动力学模拟中主要包括:速度,初始化位置,计算作用于所有原子上的力,解牛顿运动方程(速度、位置更新),原子势能的计算,每个原子的相邻原子数的计算等^[8]。

分子动力学模拟中要对运动方程进行数万至数十万步数值积分,计算的积累误差会使粒子的相空间轨迹逐渐偏离其真实解。Verlet 算法是一种高精度的收敛算法,可以在长时间的运

算中防止能量耗散,而且在仿真中每一个时间步长内只计算一次力,计算效率相对较高^[9],这种算法的描述如式(5)所示。

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) &= r(t) + v(t)\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2} F(t) \\ v(t + \frac{\Delta t}{2}) &= v(t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{F(t)}{m} \\ F(t + \Delta t) &= - \frac{\partial E(r(t + \Delta t))}{\partial r(t + \Delta t)} \end{aligned} \quad (5)$$

3 摩擦力与系统势能的关系

得到金属晶体间摩擦力在于先得到微观摩擦系统势能的变化,摩擦系统总势能由摩擦副的界面分子势能和弹性变形能组成,摩擦副的弹性变形能由摩擦副的受力、变形状况及材料性能、边界条件等确定,界面分子势能由材料的微观结构和界面分子的相对位置确定,如图 2 建立界面分子接触模型。在金属晶体中摩擦系统中的弹性变形能相对于界面分子势能小得多,计算中忽略不计,所以简化计算时只考虑摩擦界面中分子势能的变化,即文中接触界面势能变化。

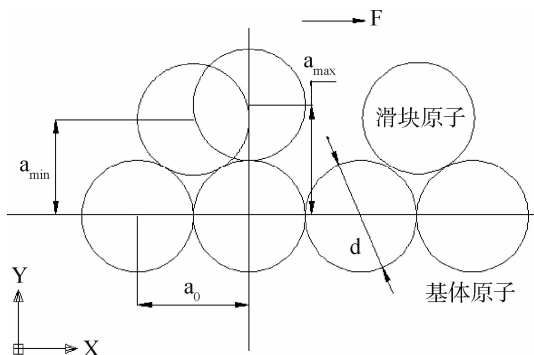


图 2 界面分子接触模型

Fig. 2 The interface molecular contact model

采用文献^[10-11]提出的通用粘附能量函数进行计算,对于摩擦副为同种金属的情况,可以近似认为界面自由能为零,滑块与光滑接触面的表面自由能($E_{表}$)相等,当两表面发生接触时,界面势能即粘附能 $E_0 = 2 E_{表}$,滑动摩擦力如式(6)所示。

$$F = \frac{E}{a_0} \quad (6)$$

式中 a_0 是材料的晶格常数, E 是沿水平方向每移动距离 a_0 时界面能量变化值,如式(7)所示。

$$E = S_{\text{真}} E_0 \times [E^*(a^*) - 1] \quad (7)$$

在界面能量变化值的计算公式中, $S_{\text{真}}$ 是真实接触面积, 表面间距 a^* (经比例调整) 可以根据金属晶体的结构算出, 如式(8)所示。

$$E^*(a^*) = -(1 + a^*)e^{-a^*} \quad (8)$$

又因为 $a^* = (y - a_{\min})/l$, y 为纵坐标值, a^* 是经比例参数 l 调整后的表面间距。 $a_{\min}$ 是最小表面间距接触界面法向距离的变化如式(9)所示。

$$D = a_{\max} - a_{\min} = \frac{\sqrt{2}}{2}a_0 - \frac{a_0}{2} = 0.207a_0 \quad (9)$$

$$a^* = \frac{0.207a_0}{l}$$

将公式(7)(8)(9)带入公式(6), 可得相同材料接触界面下滑动摩擦力计算公式(10)。

$$F_{\text{滑动}} = 2 \frac{E_{\text{真}} S_{\text{真}}}{a_0} \left[1 - \left(1 + \frac{0.207a_0}{l} \right) e^{-\frac{0.207a_0}{l}} \right] \quad (10)$$

根据库伦摩擦定律, 摩擦因数 μ 如式(11)所示。

$$\mu = \frac{F_{\text{滑动}}}{P} = 2 \frac{E_{\text{表}} S_{\text{真}}}{a_0 P} \left[1 - \left(1 + \frac{0.207a_0}{l} \right) e^{-\frac{0.207a_0}{l}} \right] \quad (11)$$

其中 P 为法向载荷。

4 计算结果与讨论

随着运动体的滑动, 基体最外层原子与运动体原子间的相互作用力由引力转变为斥力, 它们同时又受到内部其他原子的作用力, 摩擦过程分为静摩擦与滑动摩擦两个过程。静摩擦力过程: 初始位置时, 界面原子间距最小, 界面接触势能也最小, 系统总势能处于整个过程最低的稳定状态, 随后界面原子发生相对移动, 逐渐偏离初始的位置, 总势能逐渐增加, 当界面间距最大时, 系统的总势能到达最大值。滑动摩擦过程: 当界面原子越过临界状态(静摩擦变为滑动摩擦), 界面原子将自发从相对能量高的位置跳跃至下一个能量局部最小的位置, 所以静摩擦转化滑动摩擦的过程中发生了不可逆的能量耗散过程。在滑动过程, 界面原子之间的间距变化使得界面接触势能变化由最小值到最大值, 再由最大值到最小

值循环变化, 保持相对稳定。

可以将计算模拟得出曲线(见图 3)与通过表面摩擦力测试仪所测得摩擦力曲线进行对比, 归纳得出: 滑动摩擦力按基本不变的斜率增加到一定程度后突然降低, 且滑动摩擦力的这种变化呈现一定的周期性。显然, 滑动摩擦力的这种周期性变化不是由于测量误差所致, 而是滑动摩擦力的某种内在本质的反映。摩擦力周期性变化的原因, 与摩擦过程中的非平衡热力学过程密切相关, 所以图 3 势能随步数按一定规律先增加后降低, 然后呈现周期性波动是合理的。

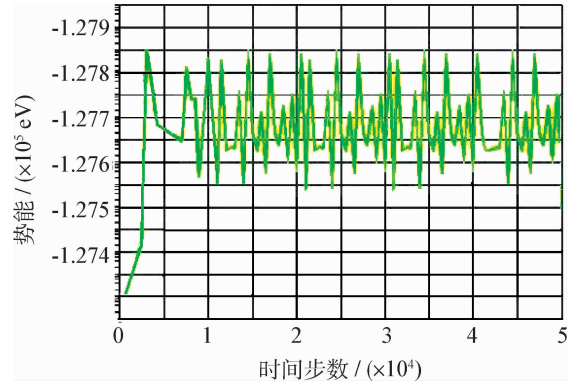


图 3 势能与时间步数关系曲线

Fig. 3 Potential energy curve with the time steps

图 4 中两表面温度随滑动时间步数的曲线中可以分析得出: 随着时间步数的继续, 基体 A 和运动体 B 滑动在步数为 7 000 后表面温度逐渐趋于稳定, 而基体 A 的表面温度高于运动体 B 的表面温度, 表明在微观中紧密接触的两物体表面各自温度并不相同, 微观滑动摩擦过程较宏观滑动摩擦过程更加激烈。

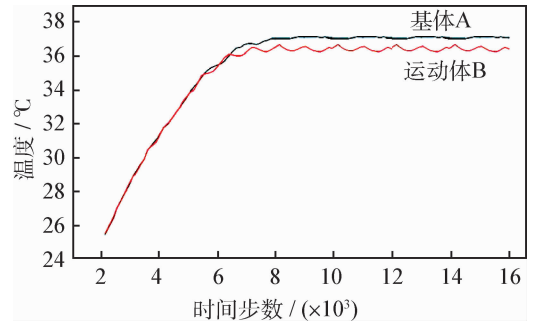


图 4 温度与时间步数关系曲线

Fig. 4 Temperature curves with the time steps

在整个运动体滑动的过程中, 随着滑动的进行, 摩擦界面接触压力开始发生变化。运动体滑

动时间步数从 8 000 以后,由于滑动距离较长,运动体与基体接触的上下表面温度逐渐趋于稳定,界面接触的压力分布也逐渐趋于一致。

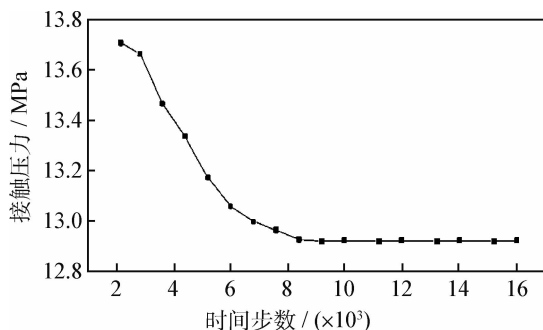


图 5 平均接触压力与时间步数关系曲线

Fig. 5 The average interface contact pressure curve with the time steps

从图 5 平均接触压力与时间步数关系曲线中看出,运动体刚开始滑动时平均接触压力明显呈现下降趋势,然后逐渐趋于平缓,结合图 4 的温度曲线可知,平均接触压力明显呈现下降趋势的时间段正是接触表面温度上升较快的时间段,这是因为:相应单元的热应变增大导致接触面积增大,所以接触面的平均接触压力会逐渐减少。运动体滑动时间步数从 8 000 以后,界面平均接触压力开始逐渐趋于稳定,这也是由于运动体与基体接触上下表面温度值达到了稳定。

5 结 论

(1) 摩擦力按基本不变的斜率增加到一定程度后突然降低,且摩擦力的这种变化呈现一定的周期性,可以得知静摩擦因数大于滑动摩擦因数,静摩擦因数逐渐增加到某一值,然后减少到某一稳定值,即滑动摩擦因数,滑动摩擦因数在此值范围内上下波动。

(2) 随着滑动的逐渐进行,滑块与基体表面的温度逐渐增加,基体和运动体滑动一定距离后表面温度逐渐趋于稳定,基体 A 的表面温度高于运动体 B 的表面温度,表明在微观中紧密接触的两物体上下表面存在温度差。

(3) 滑动后不久界面平均接触压力明显下

降,这是由于接触界面温度升高较快时,相应单元的热应变增大导致接触面积增大,所以整个接触面上的平均接触压力会逐渐减小,而后慢慢趋于平缓。

参考文献

- [1] Tomlinson G A. A molecular theory of friction [J]. Phil Mag Series, 1929, 7: 905-939.
- [2] Israelachvili J N, Adhesion. Friction and lubrication of molecularly smooth surfaces [M]. In: Singer I L, Pollock H M, Fundamental of Friction, 1991.
- [3] Homola A M, Israelachvili Mcguiggan P M, et al. Fundamental experimental studies in tribology [J]. Wear, 1990, 136: 65-83.
- [4] 龚中良, 黄平. 基于非连续能量耗散的滑动摩擦系数计算模型 [J]. 物理学报, 2011, 60(2): 31-36.
- [5] Divesh Bhatt, Ahren W Jasper, Nathan E, et al. Critical properties of aluminum [J]. J. Am. Chem. Soc., 2006, 128 (13): 4224-4225.
- [6] Min kyu Yeo, Yong Hoon Jang. Molecular dynamics simulations of a nanoscale sliding layer system [J]. Wear, 2010, 269: 206-212.
- [7] 赵健伟, 章岩, 蒋璐芸. 分子动力学方法研究纳米摩擦问题 [J]. 化学通报, 2010(2): 106-110.
- [8] 郭晓光, 郭东明, 康仁科, 等. 单晶硅磨削过程分子动力学仿真并行算法 [J]. 机械工程学报, 2008, 44(2): 108-112.
- [9] Zhou zhongrong. The development of cutting-edge tribology [M]. Beijing: Science Press, 2007, 125.
- [10] James H R, Smith J R, Ferrante J. Universal features of bonding in metals [J]. Physical Review B, 1983, 28(4): 1835-1845.
- [11] Smith J R, Perry T, Banerjee A, et al. Equivalent crystal theory of metal and semiconductor surface and defects [J]. Physical Review B, 1991, 44 (12): 6444-6465.

作者地址: 华东交通大学 机电工程学院

330013

载运工具与装备教育部重点实验室

Tel: (0791) 7046 171

E-mail: muming803@163.com