

基底势函数的无序性对静摩擦力的影响*

杨阳¹⁾ 王苍龙¹⁾ 段文山^{1)2)†} 石玉仁¹⁾ 陈建敏³⁾

1) (西北师范大学物理与电子工程学院, 西北师范大学与中国科学院近代物理研究所极端环境原子分子物理实验室, 兰州 730070)

2) (甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 兰州 730070)

3) (中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑国家重点实验室, 兰州 730000)

(2011年10月17日收到; 2011年12月12日收到修改稿)

在二维 Frenkel-Kontorova 模型中, 为了更好地模拟真实的物理系统, 采用高斯波的平移叠加作为基底, 运用分子动力学模拟方法, 讨论了有相互作用的原子平面在公度、不公度两种情况下, 原子在无序基底上运动的摩擦机理, 以及基底的无序对静摩擦力 F_s 的影响.

关键词: 摩擦, FK 模型, 公度, 不公度

PACS: 05.10.-a, 81.40.Pq, 82.20.Wt

1 引言

在凝聚态物理中, 许多非线性现象都可以用 Frenkel-Kontorova(FK) 模型来描述 [1-5]. 摩擦学的研究一直以来都是物理学界和工程界的重要课题, 在对固体摩擦现象的众多解释中, FK 模型受到越来越多的关注, 因为它可以使人们更容易理解纳米摩擦学 [6,7] 的机理. 纳米摩擦学是从原子、分子结构出发, 考察纳米尺度的表面和界面分子层间摩擦学的行为, 采用的理论分析手段主要是计算机分子动力学模拟 [8-10] 技术. FK 模型 [2] 最初是用来描述位错中心附近的晶格结构. 它描述的是处于周期外势中的原子链, 只考虑最近邻原子间的相互作用和原子链的运动方向 (忽略原子的横向位移). 随后该模型得到广泛的应用, 例如: 用于研究超离子导体 [11]、排挤子 [12]、热传导 [13-15]、吸附在晶体表面的单原子层 [16]、射频电场中的电荷密度波 (CDW) [17] 和摩擦 [5,18-20] 等等. 到目前为止, 已有许多关于一维 FK 模型的研究 [13,19,21-25], 为了研究较真实的物理系统, 把一维 FK 模型推广到二维时非常必要的.

一直以来, 人们对基底具有确定周期的 FK 模型很感兴趣, 例如, 基底是正方形对称和三角形对称 [26-33]. 在真实的物理系统中, 下层基底具

有较复杂的结构, 且基底势有几个不同的极大值和极小值 [34,35], 这时, 标准 FK 模型中的简单正弦势不再适合, 因此, 在模拟中, 我们采用高斯函数的随机平移叠加作为基底 [36] 便可达到这种要求. 文中我们主要研究在二维无序的晶格中原子的运动行为. 数值模拟中, 我们不考虑惯性和温度对系统的影响, 只考虑任意一个原子受到最近邻和次近邻的八个原子的作用 [37], 分别针对公度 (commensurate) ($b/a = 1$) 和不公度 (incommensurate) ($b/a = \frac{\sqrt{5}+1}{2}$ (golden mean)) 两种情况研究无序基底对系统静摩擦力的影响.

2 模型

为了更好地模拟真实的物理系统, 我们在本文中采用二维高斯函数 (Gaussian functions) 的随机平移叠加形式作为 FK 模型中的基底函数, 其形式如下 [36]:

$$V_{\text{sub}}(r) = \sum_{i,j=1}^{M \times N} 2Ulb \exp \left[- \left(\frac{x' - ib + qR_i}{lb} \right)^2 - \left(\frac{y' - jb + qR_j}{lb} \right)^2 \right],$$

U 和 l 分别表示高斯波的振幅和宽度; R_i, R_j 是在

* 国家自然科学基金 (批准号: 10875098) 和西北师范大学科技创新工程基金 (批准号: NWNNU-KJCXGC-03-48) 资助的课题.

† E-mail: duanws@nwnu.edu.cn

区间 $(-1, 1)$ 内任意取值的两个数组 ($i = 0, M - 1$; $j = 0, N - 1$); b 表示基底的周期; q 是空间高斯函数无序分布的加权因子 ($0 \leq q < 1$), 其中, $q = 0$ 表示规则的正方形晶格, $q \neq 0$ 表示原子排列不规则的平面晶格. 通常, 上下两层晶格间存在一个错合角 (misfit angle) θ , 这时, 基底势改写为:

$$V_{\text{sub}}(r) = \sum_{i,j=1}^{M \times N} 2Ulb \exp \left[- \left(\frac{x \cos \theta - y \sin \theta - ib + qR_i}{lb} \right)^2 - \left(\frac{x \sin \theta + y \cos \theta - jb + qR_j}{lb} \right)^2 \right],$$

在上层, 对于任意原子 $(x_{i,j}, y_{i,j})$, 我们仅考虑它与最近邻和次近邻的八个原子间的相互作用, 原子间的作用势采用简单的简谐形式 [37]:

$$V_{\text{int}} = \sum_{i,j} \frac{K}{2} [(x_{i,j} - x_{m,n} - a)^2 + (y_{i,j} - y_{m,n} - a)^2].$$

K 和 a 分别表示势的弹性系数和上层晶格常数 [38].

第 (m, n) 个原子的位移是 $r_{m,n}(x_{m,n}, y_{m,n})$, 满足下面的运动方程

$$M\ddot{r}_{m,n} + \gamma\dot{r}_{m,n} = F_{\text{ext}} - \nabla(V_{\text{sub}} + V_{\text{int}}), \quad (1)$$

M 是原子的质量, γ 表示唯象黏滞阻尼系数 ($\gamma = 0.7$), $F_{\text{ext}} = (F_{\text{ext}} \cos \alpha, F_{\text{ext}} \sin \alpha)$ 是施加给第 (m, n) 个原子的外驱动力, F_{ext} 是外驱动力, α 是外驱动力 F_{ext} 与 x 轴的夹角.

采用无量纲化, 设每个原子的质量都是 $M = 1$, 并采用四阶龙格-库塔法求解方程 (1), 为了讨论上层原子的运动情况, 定义上层原子的平均速度

$$\langle v \rangle = \frac{1}{M \times N} \sum_{i,j=1}^{M,N} \langle \dot{r}_{i,j} \rangle,$$

这里 $\langle v \rangle$ 表示对时间取平均. 在数值模拟中, 采用周期性边界条件 $x_{M+1} = x_1 + Ma$ 和 $y_{N+1} = y_1 + Na$ ($M = 10, N = 10$).

3 数值模拟结果与分析

下面我们分别研究基底在公度和不公度情况下对系统静摩擦力 F_s 的影响.

3.1 公度 ($b/a = 1$) 情况

图 (1) 描述了上层原子的平均速度 \bar{v} 随外驱动

力 F_{ext} 的变化曲线. 初始时刻上层平面的每个原子均匀地分布在下层周期势阱底, 上层的所有原子必须沿同一方向克服下层基底势的势垒, 即施加给上层的外驱动力 F_{ext} 必须足够大到可以克服这个势垒对原子的束缚, 上层原子平面才能相对于下层基底发生相对运动. 模拟结果显示, 若外界驱动力低于某个临界值时, 我们发现上层原子的平均速度为零, 这时上层原子处于静止状态; 反之, 上层原子的平均速度不为零, 即上层原子在外界驱动力的作用下开始相对运动, 我们称该阈值为系统的最大静摩擦力 F_s (简称静摩擦力). 同时我们从图中可以看出, 外驱动力沿不同方向 α 作用于上层原子时, 系统所受的静摩擦力 F_s 也不同, 即系统静摩擦力与外驱动力的方向角 α 有关. 在文献 [37] 中可得到相似的结论.

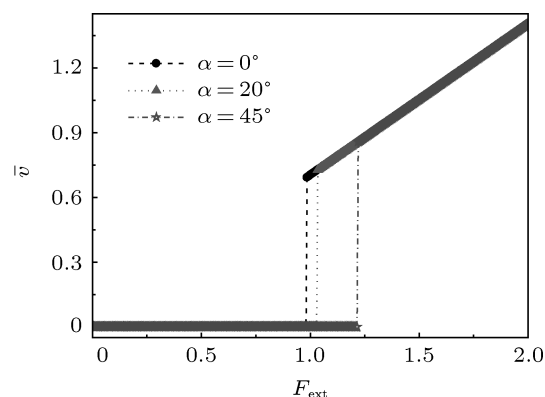


图 1 上层原子的平均速度随外驱动力的变化曲线 (模型参数: $U = 1, K = 1, q = 0, \theta = 0^\circ$)

我们从图 2(a)—(d) 中可以清楚地观察到有序基底与无序基底对系统静摩擦力的影响. 图 2(a) 和 (b) 描述了 $q = 0$ 时系统的静摩擦力 (F_s) 随 α 角的变化曲线. 图 2(a) 表示势垒高度 $U = 1$, 不同的错合角 θ 对系统静摩擦力的影响. $\theta = 0^\circ$ (即上下两层的晶格方向一致) 时, 静摩擦力关于外驱动力 F_{ext} 的方向角 α 具有高度对称性, 对称轴 $\alpha = 45^\circ$, 这是因为我们选择的基底和上层原子的排列都是正方形对称的缘故. $\theta = 20^\circ$ (即上下两层的晶格方向不一致) 时, 上层平面的每个原子不全都分布于下层周期势阱底. 此时, 克服下层基底束缚所用的外驱动力较 $\theta = 0^\circ$ 时小, 故静摩擦力 F_s 减少. 并且, 静摩擦力关于 α 角的对称性受到破坏. 图 2(b) 表示势垒高度 $U = 0.25$ 时, 不同的错合角 θ 对系统静摩擦力的影响, 模拟结果表明, 势垒的高度 U 越小, 静摩擦力 F_s 越小.

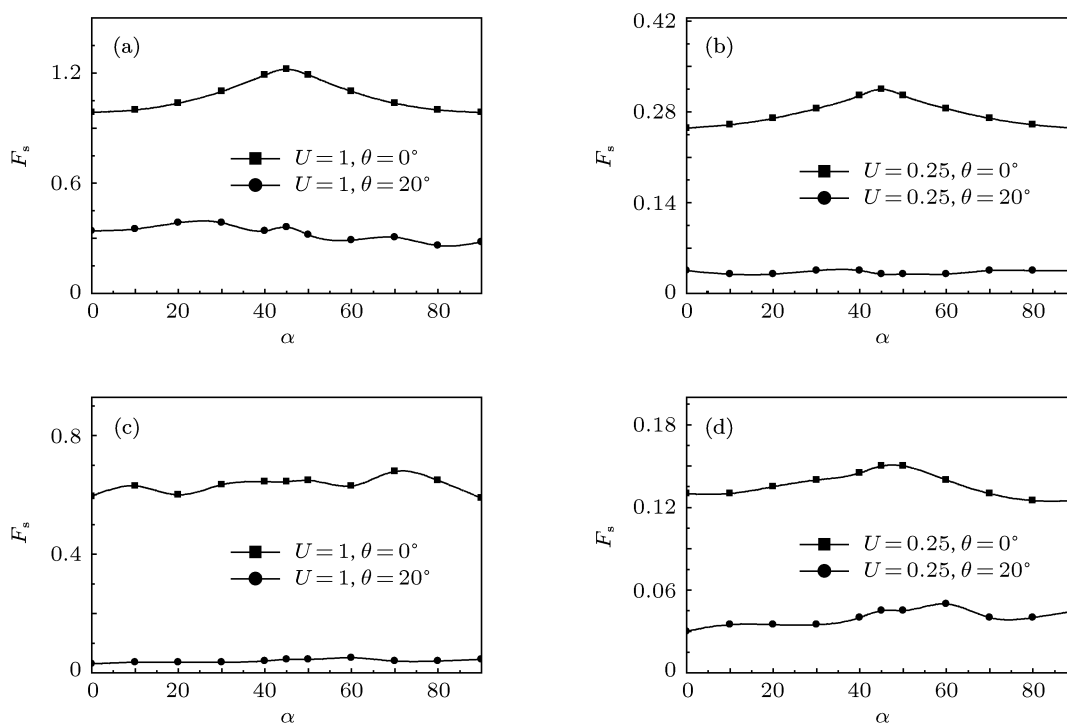

 图2 对于不同的 q 值, 静摩擦力 F_s 随 α 角的变化曲线 ($q=0$ (图 (a), (b)); $q=0.5$ (图 (c), (d)))

图 2(c) 和 (d), 描述了 $q=0.5$ 时系统的静摩擦力 (F_s) 随 α 角的变化情况. 当 $q=0.5$ 时, 空间位形高斯函数之间的随机叠加, 使基底势的各个势阱分布不均匀 (即基底不再具有正方形对称性), 上层平面的每个原子不能均匀分布在下层基底势阱底. 此时, 无序势阱对原子的束缚小于有序阱底对原子的束缚, 即 $q=0.5$ 时系统的静摩擦力 F_s 小于 $q=0$ 时系统的静摩擦力. 并且从图中的模拟结果很容易得出: 势垒高度越大, 基底对静摩擦力 F_s 的影响就越明显.

公度情况下, 只有在上下两层晶格间的错合角 $\theta=0^\circ$ 时, 在无序基底上产生的静摩擦力 F_s 明显低于有序基底上的静摩擦力 F_s . 并且在其他参数相同时, 错合角 $\theta=0^\circ$ 时的静摩擦力较大.

3.2 不公度 ($\frac{b}{a} = \frac{1}{2}(\sqrt{5} + 1)$) 情况

图 3(a)—(d) 描述了在不共度 ($b/a = (\sqrt{5} + 1)/2$) 情况下, 基底对系统静摩擦力的影响. 图 3(a), (b) 描述了在 $q=0$ (即规则的正方形对称) 时, 系统静摩擦力 (F_s) 随着外驱动力 α 角的变化曲线. 从模拟结果可以明显看出, 不公度情况下, 无序度 q 和错合角 θ 对系统静摩擦力影响较小, 并且静摩擦力 F_s 不对称, 明显小于公度情况. 不公度情况下, 上层平面的每个原子不能均匀的分布于下层周

期势阱底, 此时, 克服下层基底束缚所用的外驱动力明显小于公度情况. 图 3(c), (d) 描述了 $q=0.5$ 时, 系统静摩擦力 (F_s) 随着外驱动力 α 角的变化曲线. 模拟结果显示, 不公度情况下, 无序度 q 对系统静摩擦力 (F_s) 的影响较小.

无序度 q 主要影响基底势位形的变化: $q=0$ 时, 基底势是周期性对称的; $q=0.5$ 时, 基底势不对称. 如图 3, 不公度情况下, 无序度 q 对系统静摩擦力 (F_s) 的影响较小. 我们知道当两个表面静态接触时, 必然处于能量最低的平衡状态, 模拟显示, 如果上下层晶格处于不公度情况时, 那么接触表面的能量状态与其相对位置无关, 即对驱动原子发生运动的静摩擦力 F_s 影响不明显.

4 结论

借助于 FK 模型, 研究外驱动力作用下的二维欠阻尼系统中, 基底的无序性对系统静摩擦力 F_s 的影响. 研究表明: (1) 无序基底加权因子 q 的存在, 对公度系统的静摩擦力 F_s 影响较明显, $q > 0$ 时, 系统静摩擦力 F_s 明显减少; (2) 系统不公度时, 系统容易出现超润滑 (静摩擦力 F_s 相对非常低), q 对系统静摩擦力 F_s 的影响不明显; 并且在公度系统中错位角 θ 不为零时, 也可使系统容易出现超润滑.

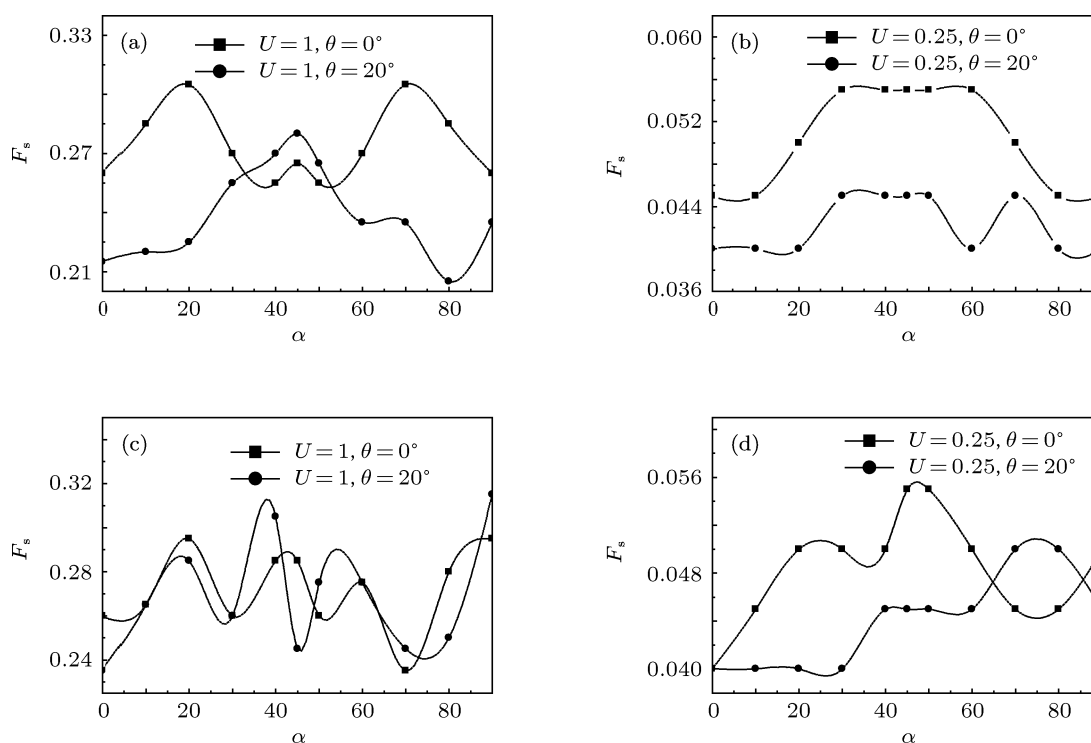


图3 对于不同的 q 值, 静摩擦力 F_s 随 α 角的变化曲线 ($q = 0$ (图 (a), (b)); $q = 0.5$ (图 (c), (d)))

[1] Braun O M, Peyrard M 1995 *Phys. Rev. E* **51** 4999
 [2] Kontorova T A, Frenkel Y I 1938 *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **8** 1340
 [3] Xu H B, Xu A G, Wang G R, Chen S G 2000 *Chin. Phys.* **9** 0611
 [4] Li H B, Zhao H, Wang Y H 2002 *Phys. Lett. A* **298** 361
 [5] Guo Y, Qu Z H, Zhang Z Y 2006 *Phys. Rev. B* **73** 094118
 [6] Persson B N J 1999 *Surf. Sci. Rep.* **33** 83
 [7] Qian L M, Luo J B, Wen S Z, Xiao X D 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2240 [钱林茂, 雒建斌, 温诗铸, 萧旭东 2000 物理学报 **49** 2240]
 [8] Wen S Z 1998 *Nano Tnbology* (Beijing: Tisinghua University Press) [温诗铸 1998 纳米摩擦学 (北京: 清华大学出版社)]
 [9] Zhang Z H, Han K, Li H P, Tang G, Wu Y X, Wang H T, Bai L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3160 (in Chinese) [张兆慧, 韩奎, 李海鹏, 唐刚, 吴玉喜, 王洪涛, 白磊 2008 物理学报 **57** 3160]
 [10] Gong B Z, Zhang B J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1504 (in Chinese) [龚博致, 张秉坚 2009 物理学报 **58** 1504]
 [11] Boyce J B, Huberman B A 1979 *Phys. Rep.* **51** 189-265
 [12] Paneth H R 1950 *Phys. Rev.* **80** 708
 [13] Hu B, Yang L 2005 *Chaos* **15** 015119
 [14] Shao Z G, Yang L, Zhong W R, He D H, Hu B 2008 *Phys. Rev. E* **78** 016130
 [15] Hu B, Yang L 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 124302
 [16] Pynn R 1979 *Nature* **281** 433
 [17] Grüner G 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 1129
 [18] Xu Z M, Huang P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2427 (in Chinese) [许中明, 黄平 2006 物理学报 **55** 2427]
 [19] Li X L, Liu F, Lin M M, Chen J M, Duan W S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2589 (in Chinese) [李晓礼, 刘锋, 林麦麦, 陈建敏, 段文山 2010 物理学报 **59** 2589]
 [20] Yang Y, Duan W S, Chen J M, Yang L, Teki J, Shao Z G, Wang C L 2010 *Phys. Rev. E* **82** 051119
 [21] Han X Q, Jiang H, Shi Y R, Liu Y X, Sun J H, Chen J M, Duan W S 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 116801
 [22] Braun O M, Bishop A R, Röder J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3692
 [23] Braun O M, Zhang H, Hu B, Tekić J 2003 *Phys. Rev. E* **67** 066602
 [24] Hirano M 2003 *Wear* **254** 932
 [25] Li H X, Xu T, Wang C B, Chen J M, Zhou H D, Liu H W 2007 *Tribol. Int* **40** 132
 [26] Yang Y, Wang C L, Duan W S, Chen J M 2011 *Chin. Phys. Lett.* **28** 030503
 [27] Yang Y, Duan W S, Yang L, Chen J M, Lin M M 2011 *Euro. Phys. Lett.* **93** 16001
 [28] Li R T, Duan W S, Yang Y, Wang C L, Chen J M 2011 *Euro. Phys. Lett.* **94** 56003
 [29] Reichhardt C, Olaon C J, Nori F 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 2648
 [30] Reichhardt C, Olson C J, Nori F 1998 *Phys. Rev. B* **58** 6534
 [31] Reichhardt C, Grønbech-Jensen N 2001 *Phys. Rev. B* **63** 054510
 [32] Reichhardt C, Zimányi G T, Grønbech-Jensen N 2001 *Phys. Rev. B* **64** 014501
 [33] Reichhardt C, Zimányi G T, Scalettar R T, Hoffmann A, Schuller I K 2001 *Phys. Rev. B* **64** 052503
 [34] Remoissenet M, Peyrard M 1984 *Phys. Rev. B* **29** 3153
 [35] Vanossi A, Röder J, Bisho A Rp, Bortolani V 2003 *Phys. Rev. E* **67** 016605
 [36] Guerra R, Vanossi A, Ferrario M 2007 *Surf. Sci.* **601** 3676
 [37] Wang C L, Duan W S, Hong X R, Chen J M 2008 *App. Phys. Lett.* **93** 1
 [38] Zheng Z G, Hu B, Hu G 1998 *Phys. Rev.* **58** 5453

The influence of the disordered substrate potential on static friction force*

Yang Yang¹⁾ Wang Cang-Long¹⁾ Duan Wen-Shan^{1)2)†}
Shi Yu-Ren¹⁾ Chen Jian-Min³⁾

1) (*College of Physics and Electronic Engineering and Joint Laboratory of Atomic and Molecular Physics of NWNNU & IMP CAS, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China*)

2) (*Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, Lanzhou 730070, China*)

3) (*State Key Laboratory of Solid Lubrication, Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China*)

(Received 17 October 2011; revised manuscript received 12 December 2011)

Abstract

In order to better simulate a real model which can be realized in experiment, we study a two-dimensional(2D) Frenkel-Kontorova(FK) model driven by the disordered substrate potential which is characterized by the sum of identical Gaussian functions. Commensurate and incommensurate interfaces are discussed. In the paper, we mainly analyse the mechanism of friction, and the effects of static friction force on the disordered substrate potential.

Keywords: friction, FK model, commensurate, incommensurate

PACS: 05.10.-a, 81.40.Pq, 82.20.Wt

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10875098), and the Natural Science Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNNU-KJCXGC-03-48).

† E-mail: duanws@nwnu.edu.cn