

# 纳米级随机粗糙表面微观滑动摩擦力的计算研究\*

王亚珍<sup>†</sup> 黄平

(华南理工大学材料科学与工程学院, 广州 510640)

(2012年10月19日收到; 2013年1月7日收到修改稿)

表面形貌很大程度上决定了摩擦副的摩擦性能, 而所有的表面都不可能是绝对光滑的. 由于摩擦表面形貌的随机性, 决定了实际的摩擦过程具有随机性的特点, 因此为了获得与随机形貌对应的摩擦特性, 建立合理的随机摩擦模型是必要的. 本文基于 Lennard-Jones 势能建立了纳米级随机粗糙表面和原子级光滑的刚性平面间的随机摩擦模型; 模型中, 界面势能由法向载荷和界面间平衡距离决定. 通过数值计算的方法, 推导了微观滑动摩擦力的计算公式和摩擦力与法向载荷之间的关系. 研究表明摩擦力随着法向载荷的增加而增加, 但不是线性增长. 结果也说明界面间的表面势能可能是微观摩擦力的本质起源.

**关键词:** 随机粗糙表面, Lennard-Jones 势能, 微滑动摩擦力, 微摩擦

**PACS:** 68.35.Af, 34.20.Gj, 62.20.Qp

**DOI:** 10.7498/aps.62.106801

## 1 引言

摩擦力和摩擦系数的定量计算研究一直是工程界和物理学界研究的重点. 近年来随着多种微观摩擦仪器的研制成功和使用, 人们在微纳米摩擦学领域取得了明显的进展. 通过对界面微观摩擦机理的研究, 不仅可以了解原子级界面黏滑运动产生的原因, 而且最终可能有望揭示摩擦的起源<sup>[1-3]</sup>.

以往对于界面微观摩擦的研究多数是以原子级光滑界面为研究对象, 建立数学物理模型为主, 先后提出了微观摩擦能量耗散的“鹅卵石”模型, Independent Oscillator (IO) 模型<sup>[4]</sup>, Frenkel-Kontorov (FK) 模型<sup>[5]</sup> 和 FK-Tomlinson (FKT) 模型<sup>[6,7]</sup> 等以及电子激励摩擦模型<sup>[8]</sup>, 并进行了大量的理论分析与实验对比研究. 但是, 实际上界面形貌具有随机性, 因此摩擦过程具有明显的随机性特点. 要获得与实际情况符合的分析结果, 就需要建立随机界面摩擦模型, 在模型中加入随机界面形貌影响因素, 并加以分析, 以获取更接近实际摩擦情况的分析结果.

本文以原子级光滑的界面和纳米级随机粗糙表面的接触为研究对象, 从原子间的 Lennard-Jones (L-J) 势能出发, 对微观滑动摩擦力的产生机制进行探讨, 研究其定量计算方法. 由于摩擦本身是一个复杂的综合过程, 其影响因素很多. 本文主要通过建立材料表面微观形貌和载荷大小与摩擦力大小的关系, 并利用已有的实验数据进行计算和分析. 通过深入的微观摩擦研究, 探索摩擦机理, 为微机电系统的摩擦学设计提供理论指导.

## 2 数学模型

对于原子级光滑表面, 其表面势能可用下面的简化式子表示:

$$u_h(x) = -U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right), \quad (1)$$

式中  $u_h$  为界面势能, 下标  $h$  表示由于原子级表面引起的界面势能的变化,  $U_0$  为界面势能幅值,  $a$  为晶格常数,  $x$  为滑动方向位移.

原子间的相互作用包括了一个引力项和一个斥力项. 当原子间的距离大于平衡距离时, 相互作

\* 国家自然科学基金(批准号: 51175182)、广东省自然科学基金(批准号: S2011040001440) 和中国博士后基金(批准号: 2012M521594) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: yazhen.wang@mail.scut.edu.cn

用力表现为引力;反之,当原子间的距离小于平衡距离时,相互作用力表现为斥力.只有在平衡距离时,结构才是稳定状态.原子之间的这种相互作用,可以用 L-J 势能来描述.

考虑一个随机粗糙表面,由于表面高度的起伏引起的上下界面原子间的 L-J 势能可以表示为

$$u_v = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{y} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{y} \right)^6 \right], \quad (2)$$

式中  $u_v$  表示由于表面粗糙不平引起的势能变化,  $y$  为上下界面原子间法向间距,  $\epsilon$  和  $\sigma$  为 L-J 常数.

所以,粗糙表面的表面势能可以表示为

$$u(x, y) = u_h + u_v \\ = -U_0 \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{y} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{y} \right)^6 \right]. \quad (3)$$

而根据势能  $u(r)$  与中心距  $r$  之间的关系,即可以得出原子间的作用力关系,其表达式为

$$f(r) = -\frac{du}{dr} = 4\epsilon(12\sigma^{12}r^{-13} - 6\sigma^6r^{-7}). \quad (4)$$

典型的两原子间 L-J 势能和相互作用力的关系如图 1 所示.

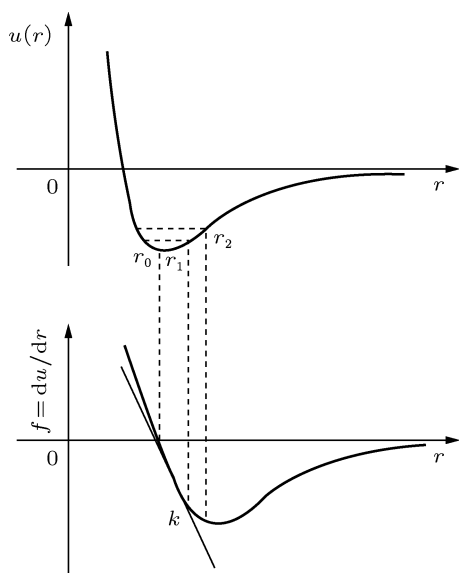


图 1 原子间的相互作用和 L-J 势能

这样,对于多原子的系统总的交互势能应为原子之间两两交互势能的总和,即:

$$U = \sum_1^{\infty} 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{1i}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{1i}} \right)^6 \right] \\ (i = 1', 2', 3', \dots), \quad (5)$$

(5) 式尽管具有一般性,但在很大程度上并不适于简单的计算.所以在下面的界面摩擦系统计算中,采用仅考虑法向距离最近的两原子间的 L-J 势能 (3) 式来描述界面间的表面势能和相互作用力.

### 3 随机界面摩擦的简化模型

考虑两个随机粗糙表面的接触情况.两随机表面的表面形貌用它们的表面高度来描述,分别为  $z_1 = h_1(x)$  和  $z_2 = h_2(x)$ , 这时它们之间的弹性接触问题可以等价为一个刚性平面和一个表面形貌为  $h(x) = h_1(x) + h_2(x)$  的弹性接触问题<sup>[9]</sup>.

在大多数的情况下,当两个随机表面的弹性表面相互接触时,不可能将两个表面完整接触,使得表面间距  $\delta = 0$ , 实际上,两个表面的间距会随机变化.当法向载荷增加时,接触的原子数增加,同时两表面的平衡间距将减小.界面间距对摩擦有重要的影响. Persson<sup>[10,11]</sup> 最近研究指出,随机粗糙表面在较小的挤压力作用下,挤压应力  $p$  和平均间距  $\delta$  之间的关系为  $p \propto \exp(-\delta/\delta_0)$ , 这里  $\delta_0$  仅与表面的粗糙度有关,而与挤压应力的大小无关.

在原子尺度范围内,考虑黏附力的影响时,我们定义一个特征距离  $d_c$  来判断是否接触.当界面原子之间的距离小于这一特征距离时,认为这两个原子已经接触;反之当界面原子之间的距离大于这一特征距离时,认为这两个原子没有接触.特征距离  $d_c$  的确定由参考文献 [12] 详细给出.

这样,对于随机接触的上下界面,可以假定上界面为刚性平面,下界面为随机弹性表面,所有的弹性变形发生在下界面.接触的粗糙峰上的原子,发生弹性变形后与上界面原子间保持一定的特征距离  $d_c$ . 对于图 2 的简化摩擦模型,假定在微摩擦过程中,所有变形均为弹性变形,且弹性变形仅发生在法向方向,不考虑磨损.

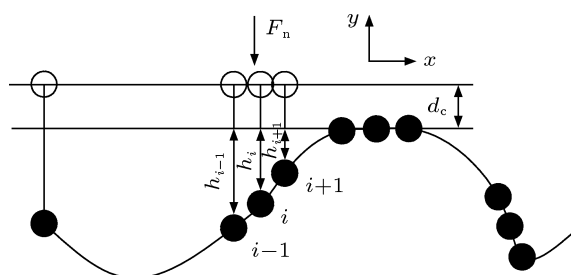


图 2 一维简化的微摩擦示意图

如图 2 所示的界面摩擦系统, 界面势能  $u$  的大小由法向载荷  $F_n$  和界面间距  $\delta$  决定, 且满足下式:

$$F_n = -\frac{\partial u}{\partial y}, \quad (6)$$

(6) 式表明: 当法向载荷  $F_n$  改变时, 界面势能  $u$  相应变化, 并自动调节界面平衡间距  $\delta$ , 使摩擦界面之间继续保持平衡. 对应于接触峰间的界面势能, 定义界面势能幅值  $U_0$ .  $U_0$  的大小对应于原子间距为特征距离  $d_c$  时的势能值. 界面势能随着法向载荷的增加而增加, 这可以解释为外加载荷的增大促使上下界面间接触原子数增多, 进而导致界面势能的增加, 宏观上表现为接触面积增大, 这个效应已经被第一性原理理论所验证. 当法向载荷  $F_n$  确定时, 界面之间的界面势能  $u$  随之确定, 此时即和大部分学者采用 IO 模型时所描述的系统相同.

在界面原子相对滑动过程中, 可以认为其必须克服因界面势能场的存在而受到的阻力作用, 这里称其为摩擦力, 其大小为

$$F_f = \frac{\partial u}{\partial x}. \quad (7)$$

摩擦界面相对滑动时, 界面之间的势能随着界面原子微观相对位置的变化而变化, 这种变化的主要原因是固体具有很强的体积效应, 在滑动过程中由于界面原子之间的相互作用, 导致界面微观间距不断变化, 从而使得界面势能相应变化. 为简化分析, 本文仅研究摩擦副为同种材料的情况, 且在计算过程中仅考虑法向距离最小的两原子之间的势能.

由于下界面随机形貌高度  $h$  与滑动方向  $x$  的函数关系为  $h(x)$ , 且  $h_i = h(x_i)$ , 于是上下界面间法向距离为

$$r_i = \delta + h_{\max} - h_i, \quad (8)$$

$$\frac{\partial h}{\partial x} = \frac{h_i(x) - h_{i-1}(x)}{\Delta x}. \quad (9)$$

用下界面的表面形貌高度间接表示上下界面的微观距离, 将 (3) 和 (8) 式代入 (7) 式可得随机界面间的摩擦力为

$$\begin{aligned} F_f &= \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u_h}{\partial x} + \frac{\partial u_v}{\partial x} \\ &= \frac{\partial u_h}{\partial x} + \frac{\partial u_v}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial x} \\ &= \frac{2\pi U_0}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &+ 24\varepsilon\sigma^6 \left[ h^{-7} - 2\sigma^6 h^{-13} \right] \frac{\partial h(x)}{\partial x} \\ &= F_{f1} + F_{f2}, \end{aligned} \quad (10)$$

在 (10) 式中, 摩擦力包括两部分, 第一部分为接触部分摩擦力, 第二部分为非接触粗糙部分摩擦力.

将 (9) 式代入 (10) 式可得非接触部分的摩擦力为

$$\begin{aligned} F_{f2} &= \sum_{i=1}^n \{ 24\varepsilon\sigma^6 [h_i(x)]^{-7} - 48\varepsilon\sigma^{12} [h_i(x)]^{-13} \} \\ &\quad \times \frac{h_i(x) - h_{i-1}(x)}{\Delta x}. \end{aligned} \quad (11)$$

对于在法向载荷作用下接触的界面原子, 由于弹性变形的作用, 在粗糙峰接触表面将会形成平面接触. 这时微滑动摩擦力的计算方法与原子级光滑的界面滑动摩擦类似. 位移  $x=0$  和  $a$  时都是稳定的平衡位置, 表面势能最低. 滑移到一半 ( $x=a/2$ ) 是不稳定的平衡位置, 弹性势能最大; 超过它滑移就自动进行下去, 直到到达下一平衡位置为止. 于是有:

$x_i < x < x_i + a/2$  时, 界面间的微摩擦力为

$$F_{fc} = \frac{2\pi U_0}{a} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right);$$

$x_i + a/2 < x < x_i + a$  时, 界面间的微摩擦力为

$$F_{fc} = 0.$$

所以在一个晶格周期中平均的微摩擦力为

$$F_{f1} = \frac{2\pi U_0}{Na^2} \sum_i \int_{x_i}^{x_i+a/2} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) dx, \quad (12)$$

式中  $N$  为在一定的法向载荷作用下接触原子数,  $a$  为晶格常数.

这样, 只要计算出接触界面在法向载荷  $F_n$  的作用下的表面势能, 即可通过数值方法计算出其和原子级光滑界面间的微滑动摩擦力.

从 (10) 式也可以看出, 宏观摩擦力与法向载荷之间的线性关系在微观领域已经不存在, 上面的研究也表明, 法向载荷将通过影响界面势能和微观接触面积而影响摩擦力的大小, 它们之间不再是简单的线性关系, 因此微摩擦系数就不再是恒定值. 实际上, 对于摩擦系统已在理论上表明, 在微观尺度, 摩擦力不是常数, 而是随着微观形貌的变化而变化.

## 4 数值计算结果与讨论

对应上面的分析, 下面采用随机粗糙表面与原子级光滑刚性表面的摩擦数值计算为例, 分析计

算摩擦力. 数值计算的参数值<sup>[11]</sup>分别为: 原子晶格常数  $a = 0.404 \text{ nm}$ ,  $d_c = 0.368 \text{ nm}$ ,  $\varepsilon = 18.6 \text{ meV}$ ,  $\sigma = 0.1 \text{ nm}$ . 图 3 是 AFM (atomic force microscope) 测量硅片的一维随机表面形貌.

由 (6) 式通过数值迭代计算得出在法向载荷  $F_n = 563.674 \text{ nN}$  时, 发生弹性变形后的一维表面形貌如图 4 所示. 图 5 显示了变形后表面势能的大小, 由于表面势能引起的局部摩擦力的大小如

图 6 所示.

从图 7 和图 8 的数值计算结果可以看出, 摩擦力随着法向载荷的增加而增加, 但明显不是线性关系. 这主要是因为法向载荷的增加, 会导致界面间平衡距离减小、接触面积增大、界面势能增加而引起的. 在法向载荷较小时, 摩擦力随着法向载荷增加的梯度明显比法向载荷较大时小.

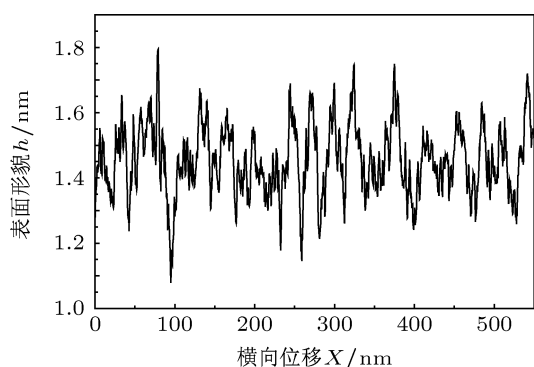


图 3 一维随机表面形貌

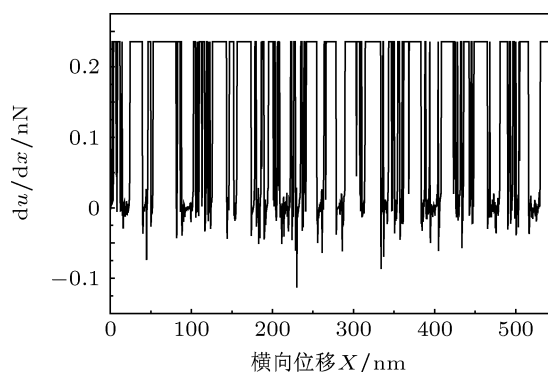


图 6 界面势能引起的摩擦力 ( $F_n = 563.674 \text{ nN}$ )

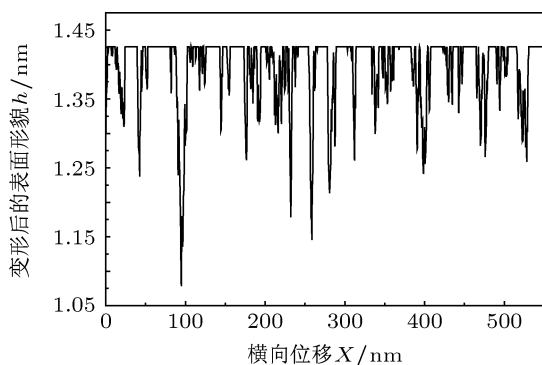


图 4 变形后的一维表面形貌 ( $F_n = 563.674 \text{ nN}$ )

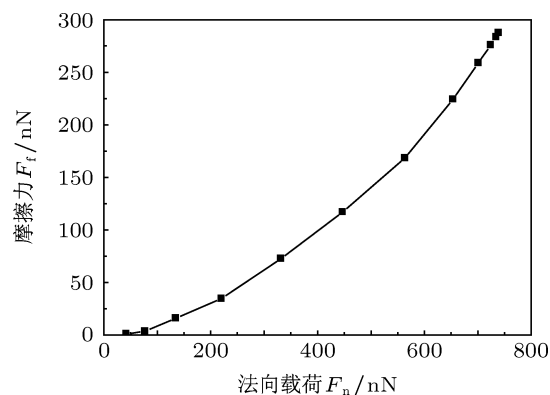


图 7 摩擦力与法向载荷的关系

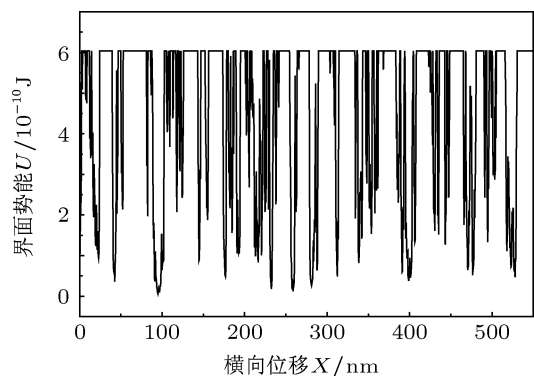


图 5 数值计算的界面势能  $U$  ( $F_n = 563.674 \text{ nN}$ )

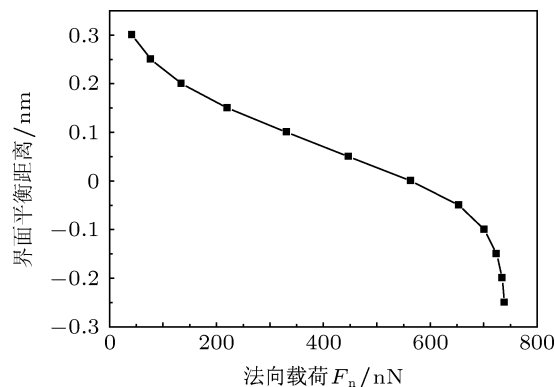


图 8 界面平衡距离与法向载荷的关系

## 5 数值计算结果与 AFM 实验结果的比较

根据 (10) 式计算的结果与 AFM 实验结果进行了对比. 实验中采用硅探针在硅表面以单线校准扫描模式在一条直线上往复扫描, 记录扫描的表面形貌和横向力回路曲线, 然后计算测量回路中耗散的摩擦功. 由于理论计算过程中, 我们采用的是离散的数值计算方法, 即以单个的原子为计算单位, 为了与 AFM 试验结果对比, 试验中设置扫描距离为  $L = Na$  (nm), 横向扫描分辨率为 1024. 采用 MATLAB 编写了计算随机界面的摩擦力程序, 为了与实验结果对比, 程序中也计算了往返扫描的过程中平均摩擦力的变化. 计算程序输入参数与实验的测量数据一致. 计算的结果如图 9 所示.

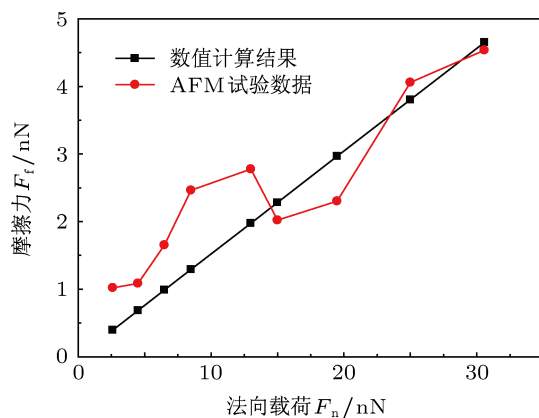


图 9 摩擦力和法向载荷的关系

从图 9 的数值计算结果来看, 在法向载荷为几十纳牛的小范围内, 数值计算的摩擦力和法向载荷之间的非线性关系并不明显, 这主要是由于实验测试过程中法向载荷的加载范围较小. 但由于现有的 AFM 实验 Si 探针在法向载荷较大时很容易断, 所以能够测量的法向载荷的范围有限, 而图 7 所示的摩擦力和法向载荷的非线性关系在较大的法向载

荷的范围内才能表现得比较清晰. 这也是作者研究过程中的难点之一, 希望在后续的试验研究中改进.

从图 9 中还可以看出, 当法向载荷较小时, 理论值与实验值误差比较大, 这可能是因为理论计算中, 仅考虑了法向距离最近的原子间势能, 而没有考虑其他原子之间的势能, 而且在理论计算中, 我们假设所有的变形都是弹性变形, 而且没有磨损, 这与实际的固体中的原子间受力和固体间的接触都存在一定的误差.

计算值与实验值存在偏差的原因除了理论模型上的简化本身的误差外, AFM 实验方面, 即使探针的球形表面有细微的差别, 也将可能导致摩擦力 - 载荷指数的较大波动. 而且原子力显微镜在测量 0.39529 nN 这样小的微力时, 本身的测量误差也会相对大一些. 此外由于各种因素的影响, 当前在微观摩擦力计算方面的理论值和实验测量值之间往往都有较大的偏差, 有时甚至可以达到几十倍. 考虑本文计算时做了一定程度的简化, 因此, 尽管存在一定偏差, 还是能够说明本文提出的理论和计算方法可行.

## 6 结论

本文基于 L-J 势能提出计算粗糙界面间摩擦力的数值计算模型, 模型中界面间的表面势能由法向载荷和平衡间距确定. 采用数值计算模拟的方法计算了在一定法向载荷作用下, 界面的表面势能的计算和摩擦力的大小, 并计算了摩擦力和法向载荷的关系. 结果表明, 摩擦力随着法向载荷的增加而增加, 但不是线性增长的关系, 这不仅和材料表面的随机形貌有关, 还和材料的晶格常数、L-J 势能常数等参数有关. 数值计算的结果和 AFM 试验结果对比发现, 该理论方法具有一定的可行性. 也就是说, 界面间的表面势能可能是摩擦力的本质起源.

[1] Robbins M O, Krim J 1998 *MRS Bull.* **23** 23  
 [2] Homola A M, Israelachvili J N, McGuiggan P M 1990 *Wear* **136** 65  
 [3] Hu Y Z, Wang H, Zou K 2000 *Tribol. Trans.* **20** 313 (in Chinese) [胡元中, 王慧, 邹鲲 2000 摩擦学学报 **20** 313]  
 [4] Tomlinson G A 1929 *Philosoph. Magazine* **7** 905  
 [5] Frenkel Y I, Kontorova T 1939 *J. Phys. (Moscow)* **1** 337  
 [6] Weiss M, Elmer F J 1996 *Phys. Rev. B* **53** 7539

[7] Weiss M, Elmer F J 1997 *Phys. B: Condens. Matter* **104** 55  
 [8] Bennewitz R, Gyalog T, Guggisberg M 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11301  
 [9] Persson B N J 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 3840  
 [10] Persson B N J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 125502  
 [11] Yang C, Persson B N J 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 215214  
 [12] Yang C 2008 *Ph. D. Dissertation* (Germany: Forschungszentrum Jülich)

# Study on micro sliding friction of randomly nanorough surface\*

Wang Ya-Zhen<sup>†</sup> Huang Ping

(School of Mechanical and Automotive Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

(Received 19 October 2012; revised manuscript received 7 January 2013)

## Abstract

As is well known, the surface topography strongly determines the tribological performance and all practical surfaces are rough. Since the actual friction process has apparently random characteristics, in order to obtain the friction suitable to the rough surface, it is necessary to set up a random friction model. In the present paper, the friction between a randomly roughness surface and an atomic-level smooth rigid plane is studied based on the Lennard-Jones potential model. A micro friction model is proposed. In the model, the potential energy between interfaces is determined by the normal load and the balanced spacing. With the numerical technique, the frictional force is calculated and the relationship between the frictional force and the normal load is analyzed as well. The results show that the friction force increases with the normal load increasing, but it increases nonlinearly. The results also show that the interfacial potential may be an essential origin of micro friction.

**Keywords:** randomly rough surface, Lennard-Jones potential, micro sliding friction, micro tribology

**PACS:** 68.35.Af, 34.20.Gj, 62.20.Qp

**DOI:** 10.7498/aps.62.106801

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51175182), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant No. S2011040001440) and the Postdoctoral Foundation of China (Grant No. 2012M521594).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: yazhen.wang@mail.scut.edu.cn