

Frenkel-Kontorova 模型中垫底势对 最大静摩擦力的影响^{*}

李晓礼¹⁾ 刘 锋¹⁾ 林麦麦¹⁾ 陈建敏²⁾ 段文山^{1)†}

1) (西北师范大学物理与工程学院, 兰州 730070)

2) (固体润滑国家重点实验室, 中国科学院兰州化学物理研究所, 兰州 720000)

(2009 年 5 月 8 日收到; 2009 年 7 月 7 日收到修改稿)

用一维 Frenkel-Kontorova 模型, 对相互接触的两个单原子分子链具有相对运动趋势时所产生的最大静摩擦力进行了研究. 分别在相邻原子的距离与周期势场的周期比 b/a 为可公度 (commensurate)、黄金分割 (golden mean)、螺旋分割 (spiral mean) 三种情况下, 描述了特殊垫底势力的振幅 A 与分子链静摩擦力的关系, 在特殊垫底势力的作用下上层原子链弹性系数 K 对静摩擦力的影响. 研究表明, 垫底势力的形式对静摩擦力的大小有很重要的影响.

关键词: Frenkel-Kontorova 模型, 静摩擦力

PACC: 4630P, 6185, 0547

1. 引 言

摩擦力和人类的生活息息相关, 摩擦现象无处不在, 无时不在. 摩擦学新材料在解决空间技术, 精密机械, 电子信息等现代高技术领域相关机械传动问题方面具有重大的意义. 近些年来, 随着超润滑材料技术的发展, 人们对摩擦力产生的微观机理的认识也在不断地深化, 相关基础研究已经成为摩擦学跨学科研究的热点. 实践证明, 摩擦学机理研究的突破对于发展摩擦学新材料和固体润滑表面工程技术具有重要作用. 因此进一步认清摩擦力和超低摩擦力产生的物理机理从而能达到控制某些特殊材料的摩擦系数将有非常重要的实际应用价值和理论意义.

为了认识摩擦力和超低摩擦力产生的微观物理机理, 摩擦学发展提出了在分子和纳米尺度下材料^[1,2]的摩擦学^[3]特性问题. 分子动力学^[4,5]的模拟正是把材料离散为由原子和分子^[1,2]构成的粒子系统, 通过运动方程解得系统中的每一个粒子的运动规律, 再由统计平均得到系统的热力学参数和输运

特性. 因此分子动力学模拟可以研究由有限数量分子和原子构成的极小尺度系统的力学响应和摩擦学行为.

在原子、分子层次对摩擦力和超低摩擦力产生的微观理论中, 我们借助于著名的一维 Frenkel-Kontorova (FK) 模型^[6-10]进行摩擦力和超低摩擦力的理论研究^[11-13]. FK 模型认为当两固体表面相接触时^[14], 上层固体薄膜由一维的线性晶格链组成, 下层固体薄膜用一周期的势场^[15-19]来表示. FK 模型在研究非平衡性质及在其他物理领域, 特别是在凝聚态物理中被广泛应用^[20-24].

一些学者利用标准的 FK 模型进行研究^[7-10]的垫底势力是正弦函数形式. 为了更清楚地研究垫底势力对静摩擦力的影响, 我们分别在可公度^[25]、黄金分割和螺旋分割三种情况下, 用数值模拟锯齿形垫底势力、方波垫底势力、非对称变形垫底势力作用下的静摩擦力. 探讨了在这几种特殊垫底势力作用下, 垫底势力的振幅 A 、原子链的弹性系数 K 与静摩擦力的关系. 结果表明, 垫底势力的形式明显影响静摩擦力的大小, 以上的重要参量对原子链静摩擦力的大小也有着重要影响.

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10875098, 50575217, 50421502) 和西北师范大学科技创新工程基金 (批准号: NWNK-KJXG-03-48, NWNK-KJXG-03-17) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: duanws@nwnu.edu.cn

2. 模型与数值过程

为了解垫底势力对原子链静摩擦力的影响,这里考虑由 N 个相同的原子组成的单原子分子链^[26],借助于 FK 模型进行摩擦力研究,FK 模型提供了一种对界面摩擦现象更完整的描述. 这个模型最早由 Frenkel 等于 1938 年为研究晶体点阵错位提出,近年来已成为低维非线性物理中的基本模型之一. 在我们的模型中,对于第 i ($1 \leq i \leq N$) 个原子满足下列无量纲运动方程:

$$\ddot{x}_i = F - \gamma \dot{x}_i - \frac{1}{2} [M(x_i)] - \frac{d}{dx_i} \left[\sum_{i \neq j} V(x_i - x_j) \right], \quad (1)$$

其中, x_i 是第 i 个原子的位置, $-\gamma \dot{x}_i$ 为阻尼项,我们用这一项来近似表示原子链中由于激发声子、光子、化学反应等产生的原子能量损耗, γ 为原子链的阻尼系数^[8,27], F 是维持链运动的无量纲外力, $M(x_i)$ 是第 i 个原子所受的与垫底势相关的力(这个力的周期为 a , 振幅为 A), $V(x_i - x_j)$ 是相邻原子对第 i 个原子的作用势^[28,29]. 我们选择简谐势为原子间的相互作用势^[16,30], 与简谐势相关的力可以写成 $K(x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1})$, 其中 K 为弹性系数. 链长为 L , 晶格常数(相邻原子间的距离)为 $b = L/N$ ^[31].

当 $b/a = 1$ 时,称为可公度^[25]; 当 $b/a = 144/233$ 时,称为黄金分割; $b/a = 351/265$ 时,称为螺旋分割. 我们分别在这三种情况下,研究几种特殊垫底势对静摩擦力的影响.

我们用四阶 Runge-Kuta 法来求解运动方程(1). 取 $N = 100$, 初始状态下体系的粒子处于静止状态. 在绝热的条件下,外力 F 以步长 $df = 0.005$ 从 0 增大到 1, 并且对于每个 F 值,取足够小的时间步长($dt = 0.006$), (1) 式经过一个时间周期 $t = 300$ 的积分运算,单原子分子链达到一个稳定的状态. 单原子分子链的平均速度定义为

$$\langle v \rangle = \frac{1}{N(t_f - t_i)} \int_{t_i}^{t_f} \sum_{i=1}^N \dot{x}_i dt. \quad (2)$$

经过时间为 $t_f - t_i = 150$ 的计算,单原子分子链在外力 F 作用下到达一定位移和速度,并把这一状态作为下一个外力 $F + df$ 作用的初始条件^[32].

3. 数值结果

为了描述更接近实际情况的垫底势相关力,同

时也是为了解用标准势函数可能产生的误差对静摩擦力大小的影响,我们分别考虑了三种特殊情况:方波、锯齿波与非对称势函数情况. 从而观察不同垫底势对静摩擦力的影响.

方波函数垫底势力可表示为

$$M(x_i) = A_1 \left(\sin \frac{\pi x_i}{\alpha} + \alpha_1 \sin \frac{3\pi x_i}{\alpha} + \alpha_2 \sin \frac{5\pi x_i}{\alpha} + \alpha_3 \sin \frac{7\pi x_i}{\alpha} + \alpha_4 \sin \frac{9\pi x_i}{\alpha} \right), \quad (3)$$

其中 $\alpha = \frac{1}{2}, \alpha_1 = \frac{17}{60}, \alpha_2 = \frac{13}{100}, \alpha_3 = \frac{4}{70}, \alpha_4 = \frac{1}{50}$.

锯齿波函数垫底势力可表示为

$$M(x_i) = A_2 \left(\cos \frac{\pi x_i}{\alpha} + \alpha_1 \cos \frac{3\pi x_i}{\alpha} + \alpha_2 \cos \frac{5\pi x_i}{\alpha} + \alpha_3 \cos \frac{7\pi x_i}{\alpha} + \alpha_4 \cos \frac{9\pi x_i}{\alpha} \right), \quad (4)$$

其中 $\alpha = \frac{1}{2}, \alpha_1 = \frac{1}{9}, \alpha_2 = \frac{1}{25}, \alpha_3 = \frac{1}{49}, \alpha_4 = \frac{1}{81}$.

非对称变形的垫底势为

$$U(x_i) = \frac{A_3}{(2\pi)^2} \times \frac{(1 - r^2)^2 [1 - \cos(2\pi x_i)]}{[1 + r^2 + 2r \cos(\pi x_i)]^2}, \quad (5)$$

其垫底势力为 $M(x_i) = \frac{\partial U_i}{\partial x_i}$, 分别令 $r = 0, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$. 在以上 7 种特殊垫底势的作用下对原子链的静摩擦力进行数值模拟.

下面通过数值模拟研究了几种特殊垫底势力对静摩擦力的影响. 为了清楚的认识在这几种特殊的垫底势作用下,外力与原子链平均速度的关系,以及垫底势力的振幅 A 、简谐式的弹性系数 K 与静摩擦力的关系,我们在图 1—4 中展示了研究结果.

图 1 由数值模拟结果给出以上几种特殊垫底势的垫底势力随坐标的变化规律,其中不同的垫底势力的振幅 A 均为 1,从而确定参数 A_1, A_2, A_3 .

图 2 给出了在黄金分割、可公度、螺旋分割三种情况下,七种不同的垫底势(垫底势力的振幅为 1)作用在原子链上,外力 F 与原子链平均速度之间的关系. 图 2 表明,垫底势力作用在原子链上,当外力刚刚大于某临界值时,原子链整体开始滑动,即原子链整体平均速度不为零,此时我们定义平均速度不为零的这一点(本文中认为这一点的平均速度为 0.01)的外力为原子链的最大静摩擦力. 从图中可以看出,不同垫底势作用在原子链上,原子链滑动

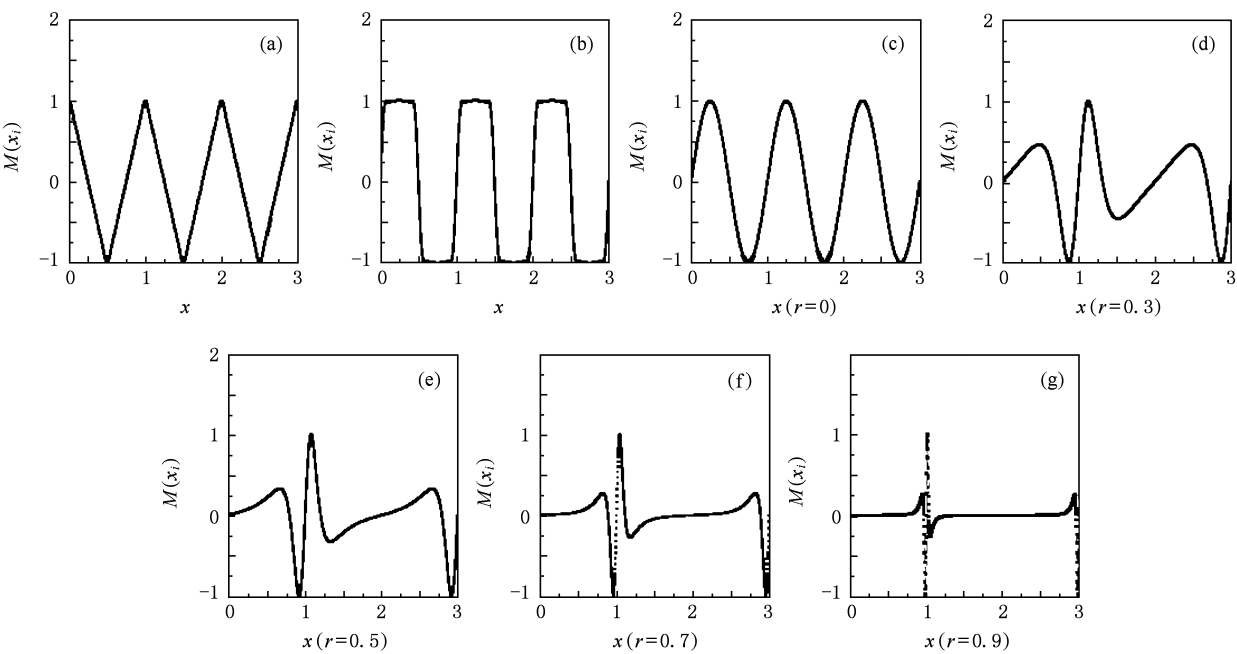


图1 垫底势力随坐标的变化规律 (a)锯齿波垫底势力,(b)方波垫底势力,(c)—(g)为非对称变形垫底势力,其中(c) $r=0$, (d) $r=0.3$, (e) $r=0.5$, (f) $r=0.7$, (g) $r=0.9$

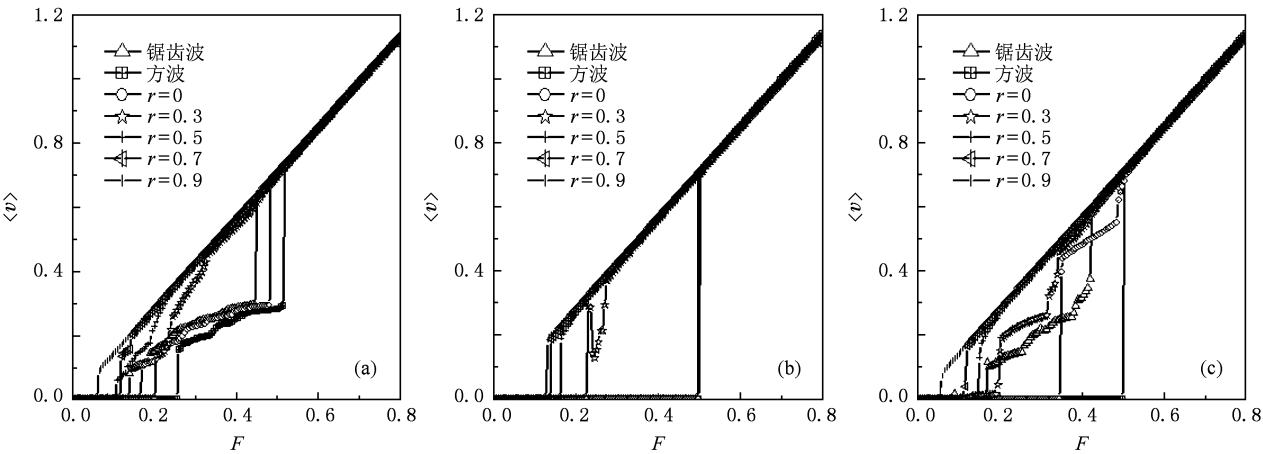


图2 锯齿波、方波、非对称变形势($r=0, r=0.3, r=0.5, r=0.7, r=0.9$)垫底势力作用在原子链上,原子链的平均速度 $\langle v \rangle$ 随外力 F 的变化情况 (简谐势弹性系数 $K=1$,耗散阻尼系数 $\gamma=0.7$). (a)黄金分割情况, (b)可公度情况, (c)螺旋分割情况

的最大静摩擦力不同. 在外力足够大时, 原子链滑动的速度同外力成线性关系.

图3 给出了在锯齿波, 方波和非对称变形势等七种不同垫底势作用下, 分别考虑黄金分割、可公度、螺旋分割三种情况, 静摩擦力 f 随垫底势力振幅 A 的变化关系. 如图3(a), 黄金分割情况下, 方波、锯齿波、非对称变形势($r=0$)垫底势力的作用下, 静摩擦力随垫底势力振幅增大得最快, 当在非对称变形势($r=0.3, r=0.5, r=0.7, r=0.9$)作用下, 总

体趋势上静摩擦力随垫底势力振幅的增大而增大, 曲线出现振荡现象. 在图3(b)中, 可公度时, 方波、锯齿波、非对称变形势($r=0$)三线重合, 静摩擦力随垫底势力振幅增长呈线性增长且增长最快. 非对称变形势($r=0.3, r=0.5, r=0.7$)作用下, 振幅在0—1之间出现振荡, 非对称变形势($r=0.9$)呈线性增长但增长最慢. 螺旋分割时, 如图3(c)所示, 静摩擦力随垫底势力振幅的变化关系同黄金分割情况很相似.

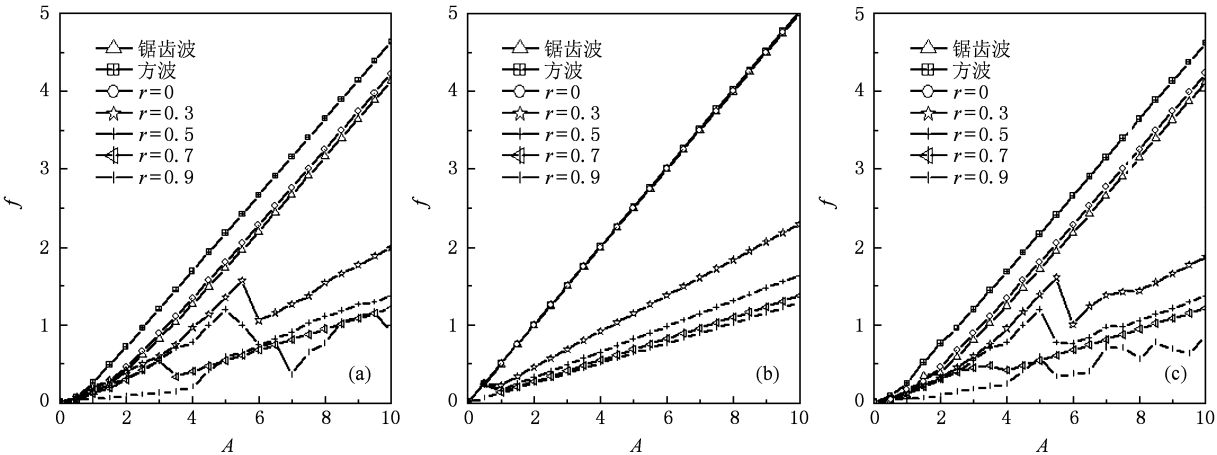


图 3 静摩擦力 f 随垫底势力振幅 A 的变化 图中曲线分别代表的是锯齿波、方波、非对称变形势垫底势力作用在原子链上,静摩擦力 f 随不同垫底势力振幅的变化情况.(简谐势弹性系数 $K=1$, 耗散阻尼系数 $\gamma=0.7$). (a) 黄金分割情况, (b) 可公度情况, (c) 螺旋分割情况

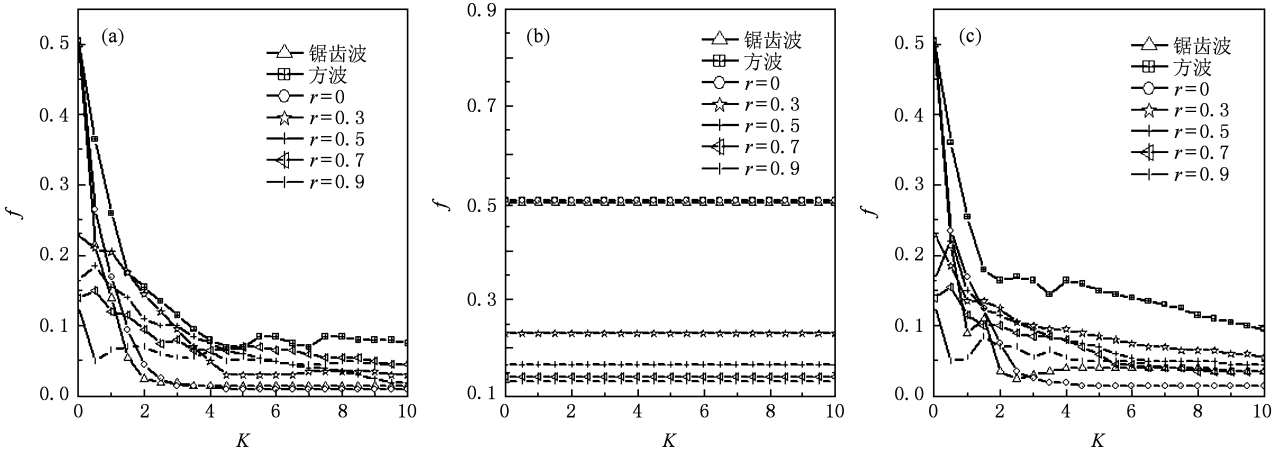


图 4 静摩擦力 f 随弹性系数 K 的变化 图中曲线分别代表的是锯齿波、方波、非对称变形势垫底势力作用在原子链上,静摩擦力 f 随弹性系数 K 的变化情况.(耗散阻尼系数 $\gamma=0.7$). (a) 黄金分割情况, (b) 可公度情况, (c) 螺旋分割情况

图 4 为不同垫底势作用下,静摩擦力 f 随简谐势弹性系数 K 的变化曲线.在黄金分割情况下(图 4(a)), $K=0$ 时静摩擦力最大,锯齿波、方波和非对称变形($r=0$)势垫底势力作用下,静摩擦力在 0.5 附近,非对称变形($r=0.3,0.5,0.7,0.9$)势作用下静摩擦力依次减小.随 K 值的增大静摩擦力总体趋势减小,曲线变化并不稳定,出现振荡.在可公度时(图 4(b)),各种垫底势的作用下,静摩擦力保持不变,不随弹性系数 K 的改变而变化,静摩擦力的值稳定在图 4(a)中 $K=0$ 时所对应静摩擦力.在螺旋分割情况下(图 4(c)),曲线的变化同黄金分割时相似,随着 K 的增大静摩擦力总体趋势减小.

4. 结 论

本文研究结果表明:1)在可公度、黄金分割、

螺旋分割三种情况下,对于不同的垫底势,原子链的最大静摩擦力是不同的.在外力足够大时,原子链滑动的平均速度同外力成线性关系.2)对于不同的垫底势,垫底势力的振幅对静摩擦力的影响不同.在可公度时,锯齿波、方波、非对称变形($r=0$)势相关力的振幅对静摩擦力的影响最大,随非对称垫底势 r 的增大,静摩擦力受垫底势力振幅的影响逐渐减小.在黄金分割、螺旋分割情况下,静摩擦力受垫底势相关力振幅影响的变化由大到小依次是:锯齿波、方波、非对称变形势($r=0,0.3,0.5,0.7,0.9$).3)在可公度时,对于七种不同垫底势的作用,静摩擦力的大小不随弹性系数 K 的改变而改变.在锯齿波,方波,非对称变形($r=0$)势作用下,静摩擦力最大,静摩擦力随非对称变形势 r 增大而减小.在黄金分割、螺旋分割时,静摩擦力总体趋势随 K 增大而减小,曲

线变化并不稳定,出现振荡.垫底势是锯齿波,方波,非对称变形势($r=0$)作用时变化最大,其他次之.可见,垫底势力的形式对静摩擦力的大小有着重要的影响,而系统的一些重要参数也不容忽视,如垫底势力的振幅以及单原子分子链相邻原子作用力的弹性系数、相邻原子的距离与周期

势场的周期之比等.通过分析几种特殊垫底势对静摩擦力大小的影响.对人们设计超润滑材料,制造具有工程应用价值的摩擦学新材料起着借鉴乃至指导作用.在下一步的研究工作中我们将把垫底势力推广到更多的形式,其中可能会蕴涵着摩擦学中更多的,更有实际意义的信息.

-
- [1] Daly C, Krim J 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 5
 - [2] Paliy M, Braun O, Dauxois T, Hu B 2005 *Phys. Rev.* **56** 4
 - [3] Qian L M, Luo J B, Wen S Z, Xiao X D 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2240 (in Chinese) [钱林茂、维建斌、温诗铸、萧旭东 2000 物理学报 **49** 2240]
 - [4] 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]
 - [5] 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]
 - [6] Xu H B, Wang G R, Chen S G 2000 *Chin. Phys.* **9** 0611
 - [7] Vanossi A, Franchini A, Bortolani V 2002 *Surf. Sci.* **502**—**503** 437
 - [8] Vanossi A, Röder J, Bishop A R, Bortolani V 2003 *Phys. Rev. E* **67** 016605
 - [9] Hu B, Yang L 2005 *Chaos* **15** 015119
 - [10] Li H B, Zhao H, Wang Y H 2002 *Phys. Lett. A* **298** 361
 - [11] Strunz T, Elmer F J 1998 *Phys. Rev. E* **58** 1601
 - [12] Braiman Y, Family F, Hentschel H G E 1997 *Phys. Rev. B* **55** 5491
 - [13] Hentschel H G E, Family F, Braiman Y 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 104
 - [14] 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]
 - [15] Tekić J, Braun O M, Hu B 2005 *Phys. Rev. E* **71** 026104
 - [16] Braun O M, Zhang H, Hu B, Tekić J 2003 *Phys. Rev. E* **67** 066602
 - [17] Braun O M, Bishop A R, Röder J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 19
 - [18] Vanossi A, Manini N, Divitini G, Santoro G E, Tosatti E 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 056101
 - [19] Wang C L, Duan W S, Hong X R, Chen J M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 153116
 - [20] Guo Y, Qu Z H, Zhang Z Y 2006 *Phys. Rev. B* **73** 094118
 - [21] Hu B, Yang L, Zhang Y 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 124302
 - [22] Zolotaryuli Y, Salerno M 2006 *Phys. Rev. E* **73** 066621
 - [23] Cuenda S, Sanchez A, Quintero N R 2006 *Phys. Rev. E* **223** 214
 - [24] Higgins M J, Bhattacharya S 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3029
 - [25] Xu H B, Xu A G, Wang G R, Chen S G 2000 *Chin. Phys.* **9** 0042
 - [26] Roberto G, Andrea V, Mauro F 2007 *Surf. Sci.* **601** 3676
 - [27] Vanossi A, Bishop A R, Franchini A, Bortolani V 2004 *Surf. Sci.* **556**—**558** 816
 - [28] Chou C I, Ho C L, Hu B, Lee H 1998 *Phys. Rev. E* **57** 3
 - [29] Chou C I, Ho C L, Hu B 1997 *Phys. Rev. E* **55** 5
 - [30] Li B W, Lan J H, Wang L 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 104302
 - [31] Zheng Z G, Hu B, Hu G 1998 *Phys. Rev. B* **58** 9
 - [32] Hu B, Tekić J 2005 *Phys. Rev. E* **72** 056602

Effect of the substrate potential on the static friction force in the Frenkel-Kontorova model^{*}

Li Xiao-Li¹⁾ Liu Feng¹⁾ Lin Mai-Mai¹⁾ Chen Jian-Min²⁾ Duan Wen-Shan^{1)†}

1) (College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

2) (State Key Laboratory of Solid Lubrication, Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Science, Lanzhou 720000, China)

(Received 8 May 2009; revised manuscript received 7 July 2009)

Abstract

By using the one-dimensional Frenkel-Kontorova (FK) model, we study the maximum static friction force between the two surface layers which are in contact. The relation between the substrate potential and the static friction force is studied in this paper. The effect of parameters of the upper layer such as the elastic coefficient K on the static friction force are also investigated. Results are obtained for three cases for which the ratio of the atomic distance to the period of potential field is commensurate, or equal to the golden mean, or the spiral mean respectively. The results show that both the form of the substrate potential and the commensurability have significant effect on the static friction force.

Keywords: Frenkel-Kontorova model, static friction force

PACC: 4630P, 6185, 0547

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10875098, 50575217, 50421502) and the Scientific and Technical Innovation Foundation of Northwest Normal University (Grant Nos. NWNNU-KJCXGC-03-48, NWNNU-KJCXGC-03-17).

[†] Corresponding author. E-mail: duanws@nwnu.edu.cn