

界面摩擦过程非连续能量耗散机理研究*

龚中良† 黄 平

(华南理工大学机械工程学院, 广州 510640)

(2007 年 7 月 5 日收到 2007 年 9 月 13 日收到修改稿)

结合无磨损界面摩擦微观能量耗散机理的复合振子模型, 运用量子理论建立了微观能量耗散的量子力学模型. 分析表明: 在滑动过程中, 当界面原子从一种平衡态跳跃至另一种平衡态时, 摩擦功以离散形式耗散为界面原子热振子, 且界面吸收能量的能力是离散的, 高能态界面较低能态界面吸收能量的能力强, 表现为易于吸收界面势能. 界面原子吸收和释放能量的离散性在宏观上表现为摩擦功耗散的非连续性, 为从微观角度解释无磨损界面摩擦状态周期性变化提供了理论基础.

关键词: 摩擦, 非连续能量耗散, 复合振子模型

PACC: 6220P, 8140P

1. 引 言

摩擦过程的能量耗散机理是预测和控制摩擦的关键^[1,2]. 近年来, 随着微纳米技术的发展, 人们对原子尺度界面摩擦的微观机理和能量耗散机理的认识有了一定的进展^[3], 提出了微观摩擦能量耗散的声子模型和电子激励模型, 并对独立振子(IO)模型、Frenkel-Kontorov (FK) 模型和 Frenkel-Kontorov-Tomlinson (FKT) 模型等各种声子摩擦模型以及电子激励摩擦模型进行了大量的理论分析与实验对比研究^[4-12]. 然而, 迄今为止人们对摩擦的微观能量耗散机理仍然知之不多^[2,13]. 1929 年, Tomlinson^[14] 提出固体摩擦能量耗散机理 IO 模型. IO 模型认为界面原子的总势能在滑动时随着微观相对位置的变化而变化, 当处于局部最低点时, 界面原子平稳滑动, 当处于局部最高点时, 界面原子将出现失稳并自动跳跃到下一局部最低点, 然后在此平衡位置剧烈振荡并激发声子, 从而使能量不可逆地以声子的形式耗散掉. 虽然 IO 模型提出了摩擦能量耗散产生的原因, 但却缺乏具体的能量耗散方式, 应用于计算时不得不对能量耗散做一些假设^[5]. FK 模型和 FKT 模型进一步考虑了界面原子间的相互作用, 但它们的能量耗散机理与 IO 模型是相同的. 许中明等^[15] 在上

述模型的基础上, 提出了无磨损界面摩擦微观能量耗散机理的复合振子模型, 指出滑动摩擦过程同时存在整体做低频弹性振动的宏观振子和界面原子受激励产生热振动的微观振子, 并分析了宏观振子和微观振子对摩擦能量耗散的不同影响. 但该模型是按照经典力学理论建立的, 不能具体分析微观振子能量吸收与释放的过程. 另一方面, 由于上述所有模型中均将原子当作经典力学系中的质点, 因而对微观尺度的研究存在一定的局限性.

本文通过引入能量量子化概念, 对微观摩擦能量耗散过程进行分析, 以期为从微观上研究摩擦能量耗散及系统热能变化提供理论基础.

2. 复合振子模型对摩擦微观能量耗散的描述

复合振子模型由宏观整体的弹性振子(刚度分别为 K_A 和 K_B) 和界面的多个微观独立振子(刚度分别为 $K_{A,S}$ 和 $K_{B,S}$) 共同组成, 如图 1 所示.

在复合振子模型中, 滑动摩擦失稳跳跃后同时出现两种不同的振子运动, 一种是物体宏观整体的低频弹性振动, 另一种是界面原子的微观高频热振动, 即声子. 在图 1 (a) 和 (b) 所示的平稳滑动阶段,

* 国家自然科学基金(批准号 50675068) 和中国博士后科学基金(批准号 20070410819) 资助的课题.

† E-mail: gzlaa@163.com

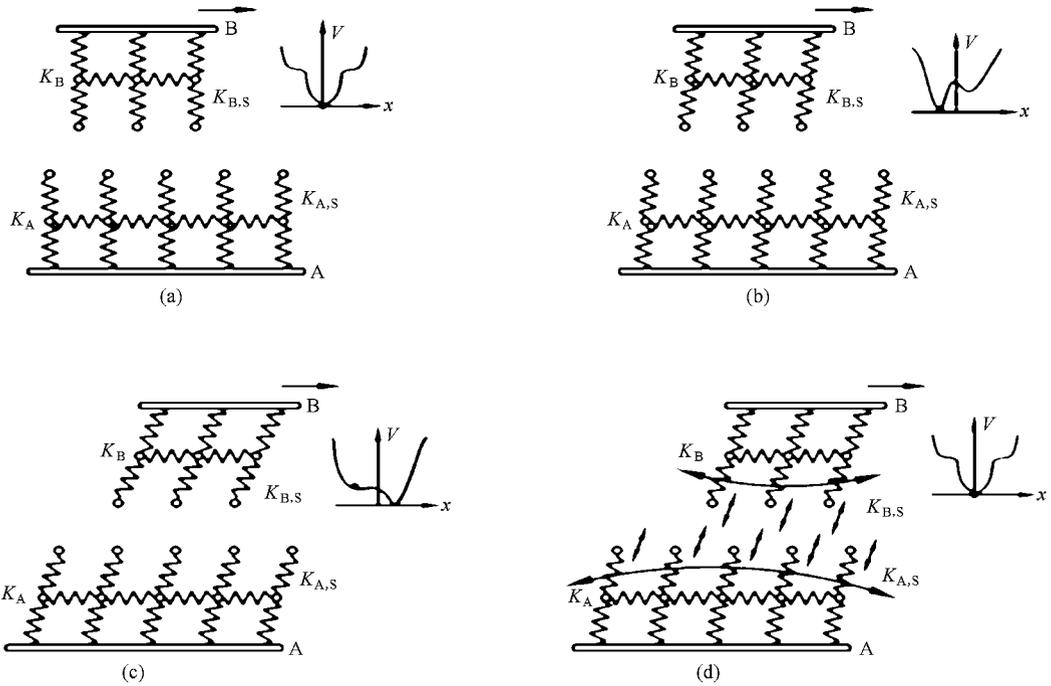


图 1 复合振子模型 V 为系统势能。(a)和(b)平稳滑动阶段 (c)临界平衡阶段 (d)复合振动阶段

物体 B 在外力的拉动下缓慢滑动,界面原子受到平衡力作用,系统总势能始终处于局部最低的稳定状态,外力做功使摩擦物体整体的弹性势能以及界面势能增加。需要强调的是,在这一阶段由于物体尚未发生宏观移动,也就没有能量损耗,因此对应的平衡力不是通常意义上的动摩擦力,可看成是静摩擦力,严格而言,它只是平衡力,而不是摩擦力。当物体 B 滑动到图 1(c)所示的临界平衡位置时,系统总势能为局部最高的不稳定状态。之后物体 B 继续向前滑动越过临界位置,此时界面原子受力突然失去平衡,因而自动跳跃到下一平衡位置,并在此位置做复合振动,如图 1(d)所示。由于这一阶段受力失去平衡,一方面摩擦物体在弹性恢复力的作用下整体作低频弹性振动,另一方面,界面势能也相应跳跃至一个较低的稳定值,从而导致界面作用力在该点出现突变。这等效于突然产生一个高频激励力,该力作用时间非常短。激励消失之后,界面原子在弹性恢复力作用下产生自由振动,振动频率为界面原子的固有振动频率。因此,在这个界面高频激励力的作用下,界面原子被激发产生与原子固有频率相同的高频振动,即热振动或声子,从而使界面势能的减小部分转化为界面层原子的热能。

根据上述模型,在正弦外力 $F_{AB} = H \sin(\omega t)$ 作用下,第 n 个原子受到来自界面作用力 F_{AB} 激励产

生的力幅为

$$F_n = \eta_1^n H = \frac{1}{|1 - (f/f_0)^2|} H. \quad (1)$$

在此力激励下,第 n 个原子得到的能量为

$$U_n = \frac{H^2}{2K_{B,S}} |1 - (f/f_0)^2|^{-2n}. \quad (2)$$

这里 f_0 为界面原子 B_1 的固有振动频率, f 为界面作用力 F_{AB} 的频率。

显然,复合振子模型是基于将界面原子作为经典力学中质点系的观点而建立的,推导所得到的各原子所受界面激励力及原子所获得的能量均为连续函数。然而,根据量子力学理论,微观粒子具有波粒二象性,原子吸收和释放的能量将不再是连续的^[16],这就不可避免地使得这些模型在研究微观摩擦功耗散时存在非连续问题。因此,有必要进一步研究摩擦过程中界面原子在外力激励作用下能量的吸收与释放过程。

由于界面原子吸收与释放能量的能力是非连续的,因此在界面摩擦过程中,当界面势能场对原子的激励未达到原子能态变化所需能量时就没有摩擦功的耗散,只有当界面激励能量达到基本量子能量的某个整数倍时才可能出现摩擦功的突然耗散。因而在微观上摩擦过程是一非稳态过程,且摩擦界面能态愈高,摩擦过程的非稳定性愈显著。

3. 非连续能量耗散模型

根据量子力学理论,微观粒子振动时所具有的能量是分级的,每个粒子的能量带由多个基本单元量子组成.基本单元量子的能量为

$$\epsilon_0 = h\nu, \quad (3)$$

式中 h 为普朗克常数, $h = 6.63 \times 10^{-34}$ Js; ν 为原子的振动频率.振子与辐射场交换的能量 ϵ 是一个离散的变量,只能取基本单元量子 ϵ_0 的整数倍,即

$$\epsilon_n = n\epsilon_0 \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4)$$

因此,在界面原子系中总有一部分原子由于外界激励能量不满一个基本单元量子而导致其振动能量不发生变化.即使激励能量增加也不一定能改变所有原子的微观振子形态,只有对某个原子的激励能量增量达到一个基本单元量子时,其振动态才发生改变,进而表现出系统热振子增加.

取一微元体,其原子排列如图 2 所示.为简化分析,作如下假设:

- (1)原子在 z 方向的排列是均匀的,且第 i 层原子在 xoy 面上单位面积的原子数为 N_i .
- (2)微元体内最低层 (L_n 层)原子为受外力激励的某一时刻可吸收一个基本单元量子,而微体外 L_{n+1} 层原子在此时刻不能获得激励能量.
- (3)在微元体的水平面上的同一层原子的微观振子态是相同的,即同一层中每个原子吸收的基本单元量子数是一致的.
- (4)在 z 方向上,上一层原子所获得的激励能量的量子数比下一层原子所获得的激励量子数多一个.

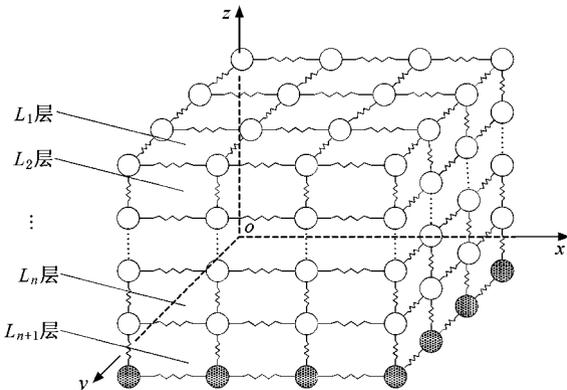


图 2 微元体原子分层模型

根据上述假设,在某一特定的时刻就有 L_{n+1} 层单个原子吸收的能量为零; L_n 层单个原子吸收的能量为 1 个基本量子 ϵ_0 ; L_{n-1} 层单个原子吸收的能量为 2 个基本量子 $2\epsilon_0$; ... L_2 层单个原子吸收的能量为 $n-1$ 个基本量子 $(n-1)\epsilon_0$; L_1 层单个原子吸收的能量为 n 个基本量子 $n\epsilon_0$.

在第 1 层至第 n 层的单位面积上的微元体内,由于外力激励在时刻 t_1 所获得的能量为

$$E_{t_1} = nN_1\epsilon_0 + (n-1)N_2\epsilon_0 + \dots + 2N_{n-1}\epsilon_0 + N_n\epsilon_0. \quad (5)$$

假设原子各层中均按同一尺度均匀分布,即

$$N = N_1 = N_2 = \dots = N_n,$$

(5)式可写为

$$\begin{aligned} E_{t_1} &= N\epsilon_0(1 + 2 + \dots + (n-1) + n) \\ &= \frac{1}{2}n(n+1)N\epsilon_0. \end{aligned} \quad (6)$$

能量非连续模型表明,只有当激励能量达到一定值时,界面原子的热振动态才发生改变.从图 3 可以看出,摩擦时界面原子对能量的吸收与释放的能力是非连续的.由于摩擦偶件边界的存在,边界处存在热量的释放.随着边界热量的释放,边界原子热振动态发生改变,进而导致摩擦界面原子的热振动态也发生改变.在摩擦界面存在着非连续的能量耗散.另一方面,摩擦偶件中原子的排列并非理想规则状态,即使是同一层原子,其所处的能级也不一定相同.在某一时刻,一些原子由于激励能量未达到原子能态变化所需能量而不吸收量子,而另一些原子因激励能量达到基本量子能量的整数倍时可以吸收一定的能量.

随着激励能量的进一步增加,根据复合振子模型中原子的力学模型,表面层原子不断将能量传递给下一层原子.假设在 t_2 时 L_{n+1} 层的每个原子可吸收一个基本单位量子,根据上述能量吸收的假设条件,则微元体所吸收的总能量为

$$\begin{aligned} E_{t_2} &= N\epsilon_0(1 + 2 + \dots + (n-1) + n + (n+1)) \\ &= \frac{1}{2}(n+1)(n+2)N\epsilon_0. \end{aligned} \quad (7)$$

微元体在 t_2 时刻的能态与 t_1 时刻的能态之间的能量差为

$$\Delta E_{1,2} = E_{t_2} - E_{t_1} = (n+1)N\epsilon_0.$$

依次类推,微元体在 t_{i+1} 时刻的能态与 t_i 时刻的能态之间的能量差为

$$\Delta E_{i,i+1} = (n + i)N\epsilon_0.$$

显然, 不同时刻微元体吸收能量的能级差分布为

$$\Delta E_{1,2}, \Delta E_{2,3}, \dots, \Delta E_{i,i+1}.$$

不同能态界面吸收能量的能级差如图 3 所示.

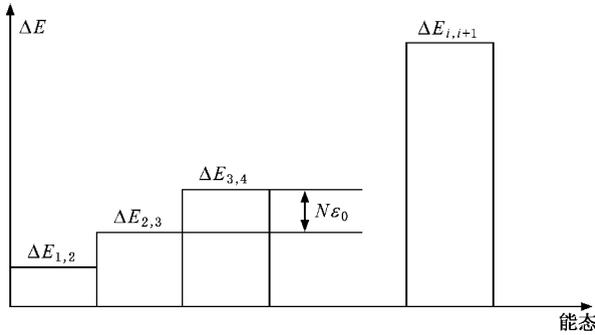


图 3 不同能态界面吸收能量的能级差 ΔE

界面能态主要表现为摩擦界面的温度及温度场分布. 按假设(4), 在微元体内温度梯度为常数, 即摩擦功耗散引起的温度变化沿摩擦界面法线方向呈线性下降. 界面原子能态(可理解为界面原子温度)较高时, 高能态原子势必向相邻的低能态原子传递能量, 在没有外界能量补充时, 高能态原子能态降低, 能态降低后的原子又具备吸收能量子的条件. 在摩

擦开始时, 界面温度逐渐升高, 此时摩擦偶件内的温度场为非稳态温度场. 随着温度的进一步升高和时间的增加, 当摩擦偶件边界释放的热量与摩擦界面产生的热量相等时, 摩擦偶件内温度场分布趋于稳定, 此时界面摩擦功的耗散量在宏观上处于一种稳定状态. 在实际的摩擦过程中, 随着界面温度(原子能态)的升高并逐渐趋于稳定, 摩擦力也渐趋稳定.

界面能态越高, 界面从一种能态转变到另一种高能态所需吸收的能量越多, 即当界面温度越高时, 界面温度升高所需的能量越大. 宏观上表现为界面摩擦产生的温升与能量的耗散量呈非线性关系, 且在低温时相同界面能量耗散产生的温升比高温时所引起的温升要高.

4. 结 论

在界面摩擦过程中, 摩擦界面的原子每次只能吸收一定的能量, 即界面吸收能量的能力是非连续的. 界面温度越高, 界面原子能态改变所需吸收的能量越多, 表现为吸收能量的非连续性越明显. 当摩擦功全部耗散为摩擦热时, 由于界面吸收能量的非连续性, 导致摩擦功耗散也是非连续的. 因此, 摩擦过程是一非稳态热力耦合过程.

- [1] Ringlein J, Robbins M O 2004 *Am. J. Phys.* **72** 884
 [2] Krim J 2002 *Surf. Sci.* **500** 741
 [3] Zhang X J, Meng Y G, Wen S Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 728 (in Chinese) [张向军、孟永钢、温诗铸 2004 物理学报 **53** 728]
 [4] Gnecco E, Bennewitz R, Socoliuc A, Meyer E 2003 *Wear* **254** 859
 [5] Sasaki N, Kobayashi K, Tsukada M 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2138
 [6] Buldum A, Ciraci S 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2606
 [7] Andrea V, Alan B R, Virginio B 2004 *Nanotechnology* **15** 790
 [8] Kawaguchi T, Matsukawa H 1997 *Phys. Rev. B* **56** 13932
 [9] Van Erp T S, Fasolino A, Radulescu O, Janssen T 1999 *Phys. Rev. B* **60** 6522

- [10] Weiss M, Elmer F J 1996 *Phys. Rev. B* **53** 7539
 [11] Ciraci S, Buldum A 2003 *Wear* **254** 911
 [12] Popov V L 2001 *Trib. Int.* **34** 277
 [13] Urbakh M, Klafter J, Gourdon D, Israelachvili J 2004 *Nature* **430** 525
 [14] Tomlinson G A 1929 *Phil. Mag. Ser.* **7** 905
 [15] 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]
 [16] Yang F J 2001 *The Atomic Physics* (Beijing: Higher Education Press) (in Chinese) [杨福家 2001 原子物理学(北京: 高等教育出版社)]

Study on discontinuous energy dissipation mechanism of friction^{*}

Gong Zhong-Liang[†] Huang Ping

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

(Received 5 July 2007; revised manuscript received 13 September 2007)

Abstract

Based on the composite oscillator model of atomic-scale wearless friction, a quantum mechanics model is proposed for analyzing the energy dissipation. The analysis indicates that the energy dissipation is discontinuous in a sliding process. The energy absorbing ability of an atom on a contact surface is discrete when the atom jumps from one equilibrium state to another. At the same time, the ability of a contact surface atom to absorb the interfacial potential energy is stronger in a high energy state than in a low energy state. This will provide the theoretical basis for analyzing the periodical change in friction.

Keywords : friction, non-continual energy dissipation, composite oscillator model

PACC : 6220P, 8140P

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50675068) and the Science Foundation for Postdoctor of China (Grant No. 20070410819).

[†] E-mail : gzlai@163.com