

تغییر فاز نیروی اصطکاک خشک بین دو سطح بلورین با نیروی عمودی

بهناز باباغلامی و علی صادقی

دانشکده فیزیک، دانشگاه شهید بهشتی، تهران

پست الکترونیکی: ali_sadeghi@sbu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۰۲/۱۸؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۰۳/۲۰)

چکیده

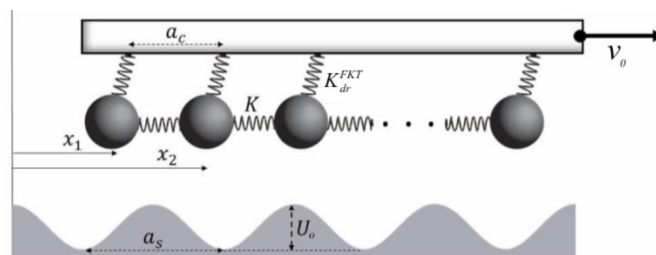
یکی از عوامل اصلی اتلاف انرژی و خوردگی سطوح، اصطکاک جنبشی در فصل مشترک دو جسم لغزنده است. در مقیاس‌های بزرگ و به طور سنتی، با وارد کردن یک مایع روان‌کننده مثل روغن این اثر ناخواسته را کاهش می‌دهند. در مقیاس‌های نانومتری یک حالت جالب و ویژه به نام ابرروانکاری مشاهده شده است که در آن اصطکاک خشک (بدون روغن‌کاری) و اتلاف بسیار ناچیز می‌شود. از سوی دیگر در این مقیاس درهم قفل‌شدگی دو سطح می‌تواند منجر به حرکتی همراه با اصطکاک خیلی زیاد و موسوم به حرکت چسبان-لغزان شود. ما گذار بین این دو فاز اصطکاکی را با مدل کردن سطح یکی از دو جسم به صورت یک زنجیره از اتم‌ها که به صورت هماهنگ ساده به یکدیگر و به بدنه جسم متصل شده‌اند و از طریق یک پتانسیل سینوسی با جسم دیگر برهم‌کنش می‌کنند بررسی می‌کنیم. دامنه این پتانسیل سینوسی، معیاری از نیروی عمودی سطح در فصل مشترک است. نتایج ما نشان می‌دهد که این تغییر فاز در یک مقدار بحرانی از دامنه اتفاق می‌افتد که مانند سهم متوسط هر ذره از اصطکاک جنبشی عملاً مستقل از اندازه سطح تماس است.

واژه‌های کلیدی: اصطکاک نانومقیاس، ابرروانکاری، حرکت چسبان-لغزان، دینامیک مولکولی

۱. مقدمه

پدیده فراهم آورده‌اند. از دیدگاه فناوری و مهندسی، اصطکاک جنبشی در مقیاس ماکروسکوپی عامل اصلی اتلاف انرژی و سایش سطوح و موجب کاهش دوام سامانه‌های مکانیکی است. از این رو کاهش آن با روان‌کننده‌های مایع (به اصطلاح روغن‌کاری) هزینه‌های اقتصادی و زیست‌محیطی را به شدت کاهش می‌دهد. از سوی دیگر در مقیاس اتمی، کاهش و حتی از بین بردن اصطکاک بدون نیاز به روان‌کننده مایع (اصطکاک خشک) دست یافتنی است [۳-۵]. این حالت که می‌توان آن را

اصطکاک پدیده‌ای آشناست و در عین حال جنبه‌های مختلفی از آن هنوز ناشناخته باقیمانده است. درک سازوکار و شناخت ویژگی‌های اصطکاکی سطوح در مقیاس‌های مختلف، هم از نظر کاربردی و هم از نظر علمی مسئله‌ای مهم بوده است. به ویژه ابزارهای توسعه یافته اخیر مانند میکروسکوپ نیروی اتمی [۱] فرصت‌های جدیدی را برای مطالعه اصطکاک در کوچک‌ترین مقیاس ممکن [۲] و عمق بخشیدن به شناخت بنیادین ما از این



شکل ۱. شکل نمادین برای توصیف اصطکاک اتمی بین دو سطح بلورین با گلوله و فنر از مدل FKT.

ساده بین نزدیکترین همسایه‌ها برای توصیف سطح جسم بلورین متحرک که آن را لغزنده هم می‌نامیم، استفاده می‌شود. هر ذره با فتری مجزا به یک تکیه‌گاه صلب که با سرعت ثابتی حرکت می‌کند و نماینده بدنه جسم لغزنده است، متصل شده و به علاوه با یک پتانسیل سینوسی که نماینده سطح بلوری بستر ثابت است برهم‌کنش می‌کند. این سامانه که اصطلاحاً مدل فرنکل - کونتورووا- تاملینسون^۴ (FKT) نامیده می‌شود به طور نمادین در شکل ۱ نشان داده شده است. در واقع در این مدل، فقط یک لایه سطحی از جسم لغزنده انعطاف‌پذیر است و لایه‌های عمیق‌تر جسم و نیز بستری که جسم بر آن می‌لغزد انعطاف ناپذیر فرض می‌شوند تا مطالعه تحلیلی مسئله امکان‌پذیر باشد. انعطاف لایه صرفاً در راستای موازی لغزش لحاظ و از جابجایی عرضی و عمود بر سطح اتم‌های این لایه صرف نظر می‌شود. این مدل قبلاً برای شرایط مرزی متناوب یعنی زنجیری با طول بی‌نهایت معرفی شده است [۸]. نمونه غیرتناوبی که در این پژوهش به کار رفته است، مدل واقعی‌تری از جسم با ابعاد محدود به نظر می‌رسد که با آن می‌توان تأثیر طول لغزنده و آثار لبه‌های آن را هم بررسی کرد.

توجه کنید که می‌توان با حذف فنرهای اتصال به بدنه صلب، تکیه‌گاه متحرک را فقط به ذره انتهایی متصل کرد تا ذرات مانند واگن‌های یک قطار پشت سر آن کشیده شوند. در این صورت مدل فرنکل - کونتورووا (FK) حاصل می‌شود که برای مطالعه کشیدن مثلاً یک نانونوار گرافن با اتصال یک سر آن به سوزن میکروسکوپ نیروی اتمی بر سطوح فلزات مناسب است. در یک مطالعه جالب با این مدل نشان داده شده است که طول نانونوار کمیت تعیین‌کننده رفتار اصطکاک در این حالت

رژیم اصطکاک ناچیز^۱ یا ابرروانکاری^۲ نامید. در مقیاس اتمی به چندین روش مختلف امکان‌پذیر شده است [۶]. مثلاً اگر بلورهای دو سطح در تماس، تناسب‌ناپذیر باشند، یعنی نسبت ثابت‌های شبکه آنها عددی گویا نباشد، رژیم اصطکاک ناچیز ناشی از روانکاری ساختاری^۳ مشاهده خواهد شد. مطالعات در مقیاس اتمی نشان داده‌اند که در حد طول بی‌نهایت و به ازای تناسب‌ناپذیرترین حالت یعنی وقتی نسبت ثابت‌های شبکه برابر نسبت طلایی $\sqrt{5} \pm 1/2$ باشد، اصطکاک اساساً از بین می‌رود. شاید به امید آن که این ویژگی به سطوح با ابعاد میکروسکوپی توسعه داده شود [۷] و یک انقلاب عظیم در صنعت به وجود آورد، توصیف و مطالعه ابرروانکاری به شدت مورد توجه قرار گرفته است.

ما در این مقاله به بررسی گذار فاز از رژیم اصطکاک معمولی به رژیم اصطکاک ناچیز برای یک بلور یک بعدی با طول محدود بر سطح بلور دیگر می‌پردازیم و نشان می‌دهیم که افزایش نیروی عمودی بین دو سطح، منجر به شکست ابرروانکاری می‌شود. با استفاده از برنامه کامپیوتری که برای حل عددی این مسئله توسعه داده‌ایم، اثر عوامل دیگری مثل طول زنجیر و سختی فنر تکیه‌گاهی که بلور متحرک را می‌کشد نیز بررسی می‌شود. در ادامه این مقاله پس از معرفی مدل و روش عددی به کار رفته، به ارائه نتایج و بحث در مورد آنها می‌پردازیم.

۲. مدل و روش محاسبات

مدل: یک زنجیره یک بعدی از ذرات با برهم‌کنش هماهنگ

۱. Ultralow friction

۲. Superlubricity

۳. Structural lubricity

۴. Frenkel-Kontorova-Tomlinson model

$$f_i^{\text{el}} = x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i, \quad (2)$$

$$f_i^{\text{sub}} = -\frac{2\pi U_0}{a_s} \cos\left(\frac{2\pi x_i}{a_s}\right), \quad (3)$$

به ترتیب نیروهای برهم‌کنش این ذره با ذرات همسایه (اول) و با بستر هستند. توجه کنید که دو ذره ابتدا و انتهای زنجیر فقط یک همسایه نزدیک دارند و نیروی کشسانی برای آنها به شکل $f_1^{\text{el}} = x_2 - x_1$ و $f_N^{\text{el}} = -(x_N - x_{N-1})$ است. سرانجام f_i^{dr} نیرویی است که توسط جسم صلب بالایی که با سرعت v حرکت می‌کند به هر یک از ذرات وارد می‌شود

$$f_i^{\text{dr}} = K_{\text{dr}}^{\text{FKT}} [v_i t + (i-1) - x_i] \quad (4)$$

معادلات حرکت ذرات یک بعدی و با هم جفت شده با پیاده‌سازی الگوریتم ورله^۱ سرعتی^۱ در قالب یک برنامه کوتاه به زبان فورترا^۲ به طور عددی حل می‌شوند. برای نتایج ارائه شده در این کار، سرعت حرکت تکیه‌گاه ۰/۰۱۶ و سختی فنرهای متصل به آن $K_{\text{dr}}^{\text{FKT}} = ۰/۱$ ثابت گرفته شده است.

۳. نتایج و بحث

ابتدا با بررسی تغییرات نیروی اصطکاک در هر لحظه، رفتار آن را برای طول‌های مختلف زنجیر بررسی می‌کنیم. مشابه تعبیر ماکروسکوپی، نیروی اصطکاک لحظه‌ای معادل همان نیرویی است که تکیه‌گاه متحرک بر زنجیره ذرات وارد می‌کند یعنی $F^{\text{dr}} = \sum_{i=1}^N f_i^{\text{dr}}$. برای یک دامنه پتانسیل کوچک، این نیرو که در شکل ۲ برحسب زمان رسم شده است، ابتدا یک روند صعودی یکنوا دارد تا این که پس از گذشت مدت زمانی که با تعداد ذرات طولانی‌تر می‌شود، به یک مقدار تقریباً ثابت می‌رسد. این حالت پایا که در آن تغییر طول فنرها تقریباً متوقف می‌شود و همه ذرات زنجیر باهم و به نرمی روی بستر سر می‌خورند، همان رژیم اصطکاک ناچیز (ابرروانکاری) است. در مقابل، در رژیم اصطکاک زیاد که با عنوان رفتار چسبان-لغزان^۳ شناخته می‌شود، ذرات مکرراً به سطح می‌چسبند و پس از تحمل

است [۹]. هر یک از دو مدل فوق در واقع تعمیمی از مدل پایه‌ای تک‌ذره‌ای موسوم به مدل پرنتل-تاملینسون (PT) است. در این مدل که علیرغم سادگی بسیاری از مشاهدات تجربی را توصیف می‌کند [۲ و ۴]، جسم لغزنده با یک ذره نقطه‌ای مدل می‌شود که توسط یک فنر بر روی یک سطح بلوری که با یک پتانسیل تناوبی توصیف می‌شود، کشیده می‌شود [۱۰ و ۱۱]. اگر در مدل FKT تعداد ذرات یک باشد، مدل پرنتل-تاملینسون حاصل می‌شود. مسلماً با این مدل ساده و تک‌ذره‌ای نمی‌توان تأثیر اندازه لغزنده را بررسی کرد.

بی‌بعدسازی: در دستگاه یکاهایی که طول بر حسب ثابت شبکه زنجیر a_c ، جرم بر حسب جرم یک ذره m و سختی فنر بین هر دو ذره مجاور بر حسب K بیان می‌شود، یکای زمان $\sqrt{K/m}$ ، یکای نیرو Ka_c و یکای انرژی Ka_c^2 خواهد بود. در این مقاله، سایر کمیت‌های مورد استفاده عبارتند از ثابت شبکه بستر a_s و دامنه پتانسیل سینوسی آن U_0 و ضریب سختی فنرهای اتصال ذرات به تکیه‌گاه، $K_{\text{dr}}^{\text{FKT}}$ ، که همگی ضرایب مسئله بوده و بر حسب یکاهای مذکور به صورت بی‌بعد بیان می‌شوند. مثلاً بزرگی U_0 به عنوان معیاری از برهم‌کنش لغزنده با بستر، متناظر با نیرویی است که با فشار عمودی بر فصل مشترک تنظیم می‌شود و اصطلاحاً نیروی عمودی سطح نام دارد. در این کار ما رفتار اصطکاکی سامانه را با تغییر طول زنجیر و دامنه پتانسیل بستر در حالتی با بیشینه تناسب ناپذیری بررسی می‌کنیم. نتایج فقط برای حالت متراکم با $a_s = (1+\sqrt{5})/2$ یعنی وقتی که ثابت شبکه بستر بزرگ‌تر از ثابت شبکه زنجیر است، نشان داده شده‌اند. برای حالت برعکس آن یعنی حالت تنک با $a_s = 2/(1+\sqrt{5})$ که ثابت شبکه بستر کوچک‌تر از ثابت شبکه زنجیر است، نتایج مشابهی به دست می‌آید.

فرمول‌بندی: معادله حرکت بی‌بعد شده هر یک از ذرات در دمای صفر به صورت زیر است

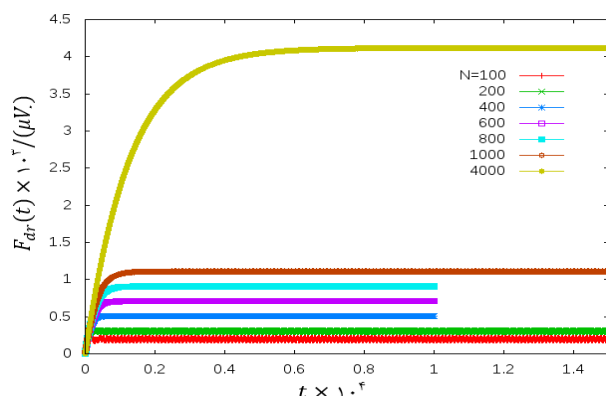
$$\ddot{x}_i + \mu \dot{x}_i = f_i^{\text{el}} + f_i^{\text{sub}} + f_i^{\text{dr}}, \quad (1)$$

در توافق با آزمایش ثابت میرایی μ برابر با مقدار بحرانی لحاظ می‌شود تا سامانه همواره در حالت میرایی بحرانی باشد. x_i مکان ذره i ام و

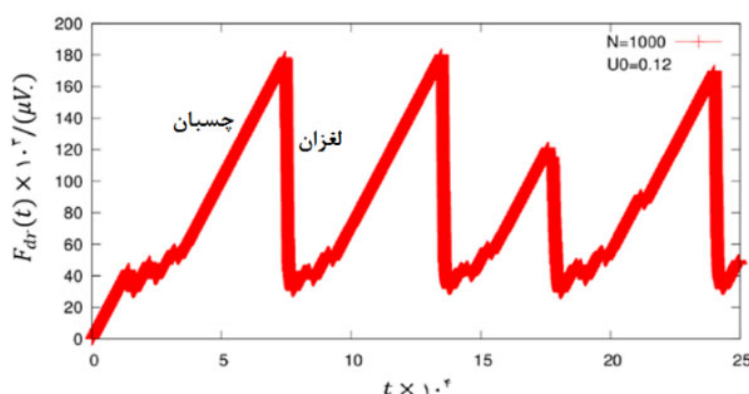
۱. Velocity Verlet algorithm

۲. FORTRAN

۳. Stick-slip



شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) اصطکاک لحظه‌ای بر حسب زمان به ازای طول‌های مختلف زنجیر.



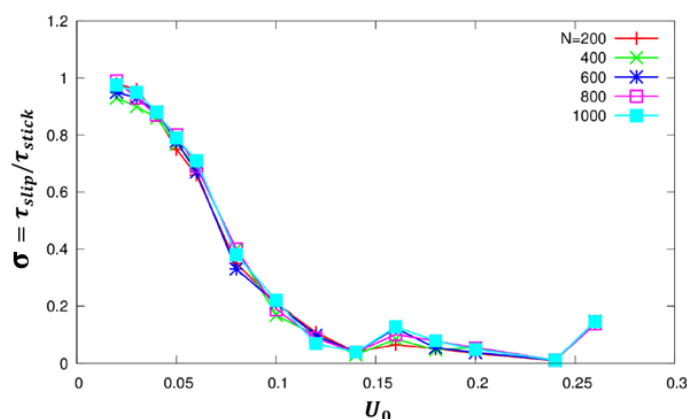
شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) اصطکاک لحظه‌ای بر حسب زمان به ازای $N=1000$ و U بزرگ‌تر از مقدار بحرانی.

لغزان هنگامی که U بزرگ باشد، در شکل ۳ نشان داده شده است. این رفتار چسبان-لغزان ناشی از گیر افتادن (چسبیدن) زنجیر در کمینه‌های انرژی پتانسیل برای مدتی طولانی و سپس لغزش ناگهانی از روی بیشینه‌ها و افتادن در دام کمینه بعدی است. گیرافتادن باعث افزایش طول فترهای اتصال به تکیه‌گاه متحرک صلب و در نتیجه زیاد شدن اصطکاک می‌شود. با افزایش دامنه پتانسیل بستر U ، ارتفاع سدهای انرژی بین کمینه‌ها زیاد می‌شود و ذرات که برای سر خوردن باید از این سدها عبور کنند باید با نیروی بزرگ‌تری کشیده شوند. قبلاً گفتیم که دما در این شبیه‌سازی‌ها صفر در نظر گرفته شده است. البته اعمال ارتعاشات گرمایی به ذرات به سادگی با افزودن یک جمله نیروی متناسب با دما (که به طور کاتوره‌ای از یک توزیع گاوسی نمونه برداری می‌شود) به معادله (۱) امکان‌پذیر است. اثر افزایش دما در شبیه‌سازی‌های اصطکاک معمولاً به صورت کاهش نیروی اصطکاک جنبشی دیده

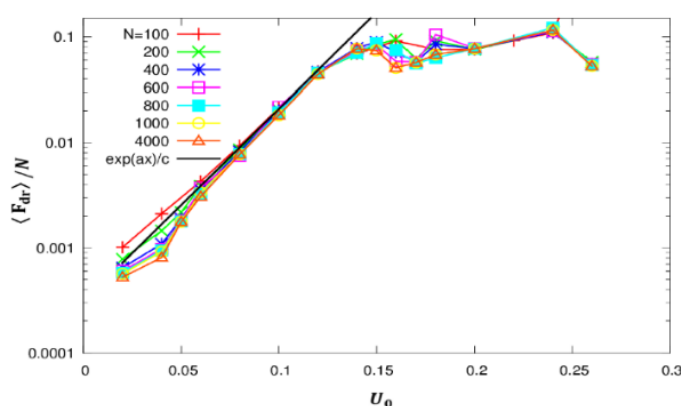
نمونه‌های مختلفی از مدل FKT در کاربردهای مختلف به کار گرفته شده‌اند. مثلاً با جایگزین کردن برهم‌کنش سینوسی با یک نیروی غیرخطی مناسب توصیف حرکت چسبان-لغزان گسل‌های زمین‌شناسی امکان‌پذیر است [۱۲].

ما در اولین آزمایش با افزایش طول زنجیر هرگز شاهد یک طول بحرانی که در آن گذار به فاز اصطکاک زیاد رخ دهد، نیستیم. این در حالی است که در مطالعات قبلی [۹] نشان داده شده بود که با مدل FK یعنی وقتی فقط یک ذره در سر زنجیر توسط عامل خارجی کشیده می‌شود، یک طول بحرانی حدود ۸۰۰ ذره وجود دارد.

در ادامه، به جای تغییر طول زنجیر، بزرگی دامنه برهم‌کنش با بستر یعنی U را به ازای چندین طول جاروب می‌کنیم. مشاهده می‌کنیم که با گذشتن از یک مقدار بحرانی $U^c \approx 0.12$ رفتار از لغزش نرم به چسبان-لغزان تغییر می‌یابد. نمونه‌ای از تغییرات اصطکاک در طی این حرکت چسبان-



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) تغییرات نسبت مدت زمان حالت لغزان به چسبان بر حسب U_0 به ازای N های مختلف.



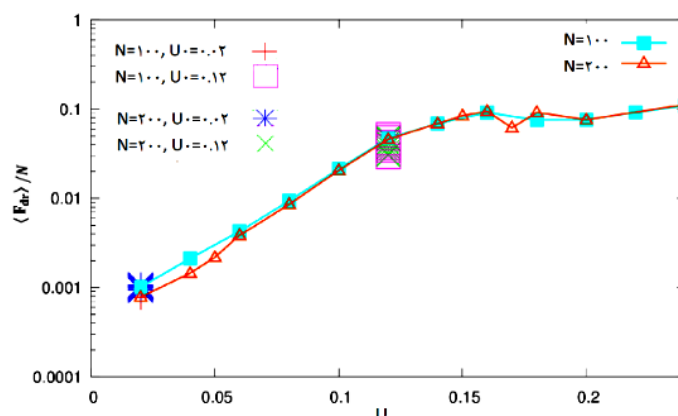
شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نیروی اصطکاک جنبشی میانگین هر ذره بر حسب U_0 به ازای طول های مختلف.

دو زمان در شکل ۴ رسم شده است. مشاهده می شود که به ازای U_0 های کوچک، این نسبت به واحد نزدیک است و بنابراین در این محدوده ابروانکاری مشاهده می شود. ولی به ازای مقادیر بالاتر از $U_0^c \approx 0.12$ این نسبت به صفر نزدیک است و بنابراین زنجیر با یک رفتار چسبان-لغزان بر بستر حرکت می کند و اصطکاک زیادی را تجربه می کند.

همان طور که قبلاً اشاره شد، آنچه در عمل به عنوان نیروی اصطکاک جنبشی می شناسیم متوسط زمانی نیروی اصطکاک در حالت پایاست. در ادامه به بررسی این متوسط می پردازیم. در شکل ۵ مشاهده می شود که اصطکاک جنبشی به ازای هر ذره مستقل از طول زنجیر است و رفتار کیفی بسیار ویژه ای دارد: (الف) به ازای U_0 کم، اصطکاک با U_0 به شکل نمایی افزایش می یابد و (ب) برای دامنه های بزرگتر از U_0^c ، اصطکاک جنبشی تقریباً از U_0 مستقل می شود. در حال حاضر ما قادر به توجیه

می شود که دلیل آن کوتاه شدن زمان متوسط قفل شدگی با تحرک های گرمایی است. به عبارت روشن تر، ذرات به دلیل ارتعاشات کاتوره ای گرمایی بخت آن را دارند که از سد پتانسیل زودتر از موعد بپرند، و بنابراین اصطکاک متوسط کاهش می یابد. مانند مرجع [۹]، ما در چند آزمون افزودن جمله گرمایی را در تغییر نحوه رفتار اصطکاکی بی اثر یافتیم و بنابراین ما هم در این کار با تمرکز بر ویژگی های ساختاری فصل مشترک، خود را به حد بالای اصطکاک یعنی حد دمای صفر محدود می کنیم.

نشانه رفتار چسبان-لغزان، حرکت گسسته ذرات و مرکز جرم زنجیر و همزمان نیم رخ دندان اره ای برای نیروی اصطکاک (شکل ۳) است. بر این اساس می توان ادعا کرد که ابروانکاری زمانی روی می دهد که زمان فاز لغزش (τ_{slip}) در مقایسه با زمان فاز چسبان (τ_{stick}) قابل مقایسه باشد. متوسط نسبت این



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نیروی اصطکاک جنبشی میانگین هر ذره بر حسب U به ازای $N=100$ و $N=200$.

اصطکاک را در این بازه از ضرایب تغییر دهیم، کافی است تنها نیروی عمودی که دو سطح را بر هم می‌فشارد را تنظیم کنیم.

۴. جمع‌بندی و خلاصه

مدل FKT برای توصیف لغزش یک بلور با ضخامتی بیش از یک لایه اتمی بر سطح بلوری دیگر مناسب است. در این مدل یک لایه اتمی از بلور لغزان که در تماس مستقیم با سطح بلور دیگر است با یک زنجیره از ذرات که با فنر به هم جفت شده‌اند و با فنرهای دیگری به بدنه بلور لغزان متصل‌اند، مدل می‌شود. نتایج ما نشان می‌دهد که بر خلاف مدل FK که برای نمایش کشیده شدن یک نانونوار از یک سرش بر سطح بلورین بستر متناسب است، در مدل FKT با تغییر تعداد ذرات زنجیر، گذار فازی در اصطکاک رخ نمی‌دهد. در عوض با افزایش دامنه پتانسیل بستر، به خاطر قفل شدن ذرات در بستر در مقدار بحرانی $U^c \approx 0.12$ رفتار اصطکاکی از حالت ابرروانکاری به چسبان-لغزان تغییر می‌یابد. این نتیجه مستقل از سختی کشسانی اتصال به بدنه بلور و اندازه سطح تماس است.

کامل و کمی این دو رفتار نیستیم و امیدواریم در پژوهش‌های آینده بتوانیم به آن پاسخ دقیقی ارائه دهیم. اما به طور شهودی می‌توان استدلال کرد که وقتی دامنه پتانسیل بستر خیلی بزرگ باشد، برهم‌کنش یک ذره با ذرات مجاور خود در مقایسه با برهم‌کنش با بستر قابل صرف نظر کردن می‌شود به طوری که هر یک از ذرات زنجیر عملاً مانند ذرات مستقل از هم، از مدل PT پیروی می‌کند و بنابراین نیروی متوسط از تعداد ذرات مستقل است.

در انتها اثر سختی K_{dr} بر اصطکاک را به ازای ۱۰۰ و ۲۰۰ ذره در زنجیر در دو مقدار پتانسیل پایین و بالای مقدار بحرانی مورد بررسی قرار می‌دهیم. مطابق با شکل ۶، به ازای چند مقدار متفاوت پتانسیل، نمودارهای اصطکاک به ازای مقادیر مختلف N و K_{dr} ، تقریباً روی یکدیگر می‌افتد و این بدین معناست که صرفاً دامنه پتانسیل در اصطکاک تعیین کننده است و سختی فنرهای اتصال به تکیه‌گاه تغییری در اصطکاک ایجاد نمی‌کنند. به عبارت دیگر می‌توان اطمینان داشت که نتایج حاصل چندان وابسته به ضرایب کشسانی نیست. برای این که بخواهیم رفتار

مراجع

1. G Binnig, C F Quate, and Ch Gerber, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 930.
2. C M Mate, G M McClelland, R Erlandsson, and S Chiang, *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 1942.
3. E Meyer and E Gnecco, *Friction* **2** (2014) 106.
4. A Socoliuc, R Bennewitz, E Gnecco, and E Meyer, *Phys. Rev. Lett.* **92** (2004) 134301.
5. M Hirano, *Wear* **254** (2003) 932.
6. J M Martin and A Erdemi, *Physics Today* **71** (2018).
7. M Urbakh, *Nature Nanotech.* **12** (2013) 893.
8. M Weiss and F J Elmer, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 7539.
9. M Ma, A Benassi, A Vanossi, and M Urbakh, *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015) 055501.

۱۲. م سرکرده‌ای، مجله پژوهش فیزیک ایران ۵، ۲ (۱۳۸۰) ۲۶۷.
10. L Prandtl, *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik* **8** (1928) 85.
11. G A Tomlinson, *Dublin Phil. Mag. J. Sci.* **7**, 46 (1929) 905.
12. M Sarkardei, *Iranian J. Phys. Res.* **5**, 2 (2001) 267.