

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Заскока Антон Миколайович

УДК 539.62:621.891(043.3)

**ФАЗОВІ ПЕРЕХОДИ В УЛЬТРАТОНКИХ ТВЕРДОПОДІБНИХ
ПЛІВКАХ МАСТИЛА ПРИ МЕЖОВОМУ ТЕРТІ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Суми – 2015

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана у Сумському державному університеті
Міністерства освіти і науки України.

Науковий керівник – кандидат фізико-математичних наук, доцент
Ляшенко Яків Олександрович,
доцент кафедри моделювання складних систем
Сумського державного університету.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Войтенко Олександр Іванович,
провідний науковий співробітник відділу фізики
кристалів Інституту фізики НАН України;

доктор фізико-математичних наук, професор
Харченко Дмитро Олегович,
завідувач відділу моделювання радіаційних ефектів та
мікроструктурних перетворень у конструкційних
матеріалах Інституту прикладної фізики НАН України.

Захист відбудеться «29» січня 2016 р. о 12-й годині на засіданні спеціалізованої
вченої ради Д 55.051.02 Сумського державного університету за адресою: 40007,
м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2, корпус ЕТ, ауд. 236.

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Сумського державного
університету за адресою: 40007, м. Суми, вул. Римського-Корсакова, 2.

Автореферат розіслано « 24 » грудня 2015 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради

І. В. Чешко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Молекули рідини, які затиснуті у сильно обмеженому просторі, мають динамічні властивості, які повністю відрізняються від властивостей об'ємних мастил. Наприклад, молекули рідини затиснуті між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями можуть утворювати квазі-дискретні шари, властивості яких залежать від кількості шарів, і такі ультратонкі мастила часто поводять себе більше як тверде тіло або рідкий кристал, ніж звичайна рідина: протистоять повному здавлюванню і зсувним напруженням. Сили взаємодії між поверхнями стають дуже складними, коли останні наближаються на відстань ближче 5-10 атомарних діаметрів. У цьому режимі класична теорія не здатна описати взаємодію між поверхнями і частинками рідини, такий режим отримав назву межового. У межовому режимі часто спостерігається переривчастий (stick-slip) рух поверхонь, що зсуваються. Він проявляє себе у багатьох випадках у повсякденному житті: скрип дверей, автомобільних гальмів, скреготіння зубів, землетруси, звук, що створюється ковзанням смичка по струнам скрипки тощо. В усіх цих випадках просте прикладення сталої сили або швидкості зсуву приводить до широкого спектру stick-slip рухів або звуку.

Стрімкий розвиток електроніки та мініатюризація деталей ставить перед інженерами проблему забезпечення стійкої роботи розроблюваних механізмів. Часто деталі, що труться настільки малі, що мастило між ними або відсутнє взагалі, або являє собою ультратонкий шар, властивості якого суттєво відрізняються від властивостей об'ємних мастил. У таких механізмах можлива реалізація переривчастого stick-slip руху, який є основною причиною завчасного зношування поверхонь тертя. З метою забезпечення стійкої роботи механізмів проводяться численні експерименти з вивчення переривчастого режиму з використанням атомно-силової мікроскопії (AFM) і апарату поверхневих сил (SFA). Зокрема, за допомогою SFA вивчається режим "резонансного тертя" при швидкості зсуву від 5 до 25 м/с та проводяться дослідження трибологічних властивостей біологічних об'єктів. Іншим експериментальним пристроєм слугує віброметр, при використанні якого встановлена подібність землетрусів з нестабільністю stick-slip переходів.

Разом з експериментальними дослідженнями існує багато робіт, де поведінку межових мастил вивчають з використанням методів молекулярної динаміки і на основі феноменологічних моделей. Попри те, що на сьогоднішній день існує величезна кількість як експериментальних, так і теоретичних робіт, досі не існує універсального підходу, який здатен охопити усю складність процесу, тому продовжуються дослідження межового мастила на основі феноменологічних моделей для визначення фізичних закономірностей, що

лежать в основі експериментальних результатів. Таким чином, на сьогодні існує безсумнівна необхідність в теоретичному вивченні процесів тертя на нанорівні.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Дисертаційна робота виконана на кафедрі моделювання складних систем Сумського державного університету і пов'язана з виконанням наступних науково-дослідних робіт: держбюджетної теми “Реологічні властивості трибологічних систем у режимі межового тертя” (2011 – 2016 рр.), № 0111U009623, виконавець; держбюджетної теми “Моделювання тертя металевих наночастинок і межових плівок рідин, що взаємодіють із атомарно-гладкими поверхнями” (2012 – 2014 рр.), № 0112U001380, виконавець; науково-дослідна робота в рамках гранта Президента України GP/F44/010 “Феноменологічна теорія межового тертя в трибологічних наносистемах” (2012 р.), № 0112U007318, виконавець; науково-дослідна робота в рамках гранта Президента України GP/F49/044 “Термодинамічна теорія прослизання по границям зерен у проблемі надпластичності наноструктурованих металів” (2013 р.), № 0113U007248, виконавець.

Мета і задачі досліджень. Мета дисертаційної роботи полягає у встановленні впливу керуючих параметрів на процеси межового тертя при фазових переходах в трибологічній системі на основі подальших модифікацій термодинамічної моделі, що описує поведінку ультратонкого мастила, затиснутого між двома атомарно-гладкими поверхнями при їх взаємному зміщенні, а також аналізі процесів зсувного плавлення при врахуванні універсальної залежності в'язкості від температури і швидкості зсуву.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити наступні завдання:

- описати причини виникнення переривчастого режиму руху в рамках термодинамічної моделі плавлення ультратонких шарів твердоподібного мастила при фахових переходах першого та другого родів;
- дослідити вплив керуючих параметрів: температури, швидкості зсуву, циклічної частоти, а також коефіцієнта жорсткості, площі контакту на умови переходу твердоподібного мастила в рідиноподібний стан;
- у рамках феноменологічної моделі врахувати універсальну залежність в'язкості мастила від температури і швидкості зсуву та описати квазістатичну силу тертя в нанотрибологічній системі;
- врахувати лінійний доданок в розкладанні термодинамічного потенціалу в ряд за степенями параметра порядку, та описати ефекти пам'яті, які спостерігаються експериментально;

Об'єкт дослідження – процеси зсувного плавлення, що спостерігаються в ультратонких твердоподібних плівках мастила при межовому терті.

Предмет дослідження – фазові переходи в ультратонких твердоподібних плівках мастила, які затиснуті між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями та процеси тертя цих поверхонь.

Методи дослідження. У роботі використовувались методи математичного аналізу та моделювання, методи математичної фізики та порівняння отриманих розрахункових результатів з експериментальними та теоретичними даними інших авторів. Для опису руху спрощених механічних аналогів трибологічних систем проводились чисельні розв'язки нелінійних диференціальних рівнянь з використанням адіабатичного наближення за допомогою методів Рунге-Кутти 4-го порядку та Ойлера.

Наукова новизна отриманих результатів.

1. Уперше теоретично встановлено, що при зміні параметрів нанотрибологічної системи таких як жорсткість пружини та температура мастила, для трьох типів рідин (псевдопластичних, ньютонівських та ділатантних), мінімальну силу тертя в трибосистемі завжди забезпечує псевдопластичне мастило, хоча пружні напруження при цьому можуть бути максимальними.

2. Уперше показано, що наявність пружної взаємодії у нанотрибологічній системі суттєво збільшує ширину гістерезису на залежності сили тертя від температури за рахунок фазових переходів першого роду порівняно з розрахованою за умови фіксованої швидкості зсуву. Гістерезис на залежності сили тертя від швидкості зсуву при фіксованій температурі відсутній за наявності пружного зв'язку.

3. Уперше досліджено поведінку трибологічної системи при термодинамічному потенціалі з урахуванням лінійного доданку. Показано, що ненульове значення параметра порядку для розплавленого мастила дозволяє описати квазістатичну силу тертя.

4. Показано, що під час функціонування нанотрибологічної системи в режимі рідиноподібного тертя різний час зупинки зовнішнього приводу приводить до часткового або повного тверднення мастильного матеріалу. За допомогою цього описані та пояснені ефекти пам'яті, які проявляються наявністю піків різної висоти на залежностях сили тертя від часу за умови повторного увімкнення зовнішнього приводу.

Практичне значення результатів. Результати роботи дозволили розширити уявлення про фізику тертя, яке відбувається на нанорозмірних масштабах. Подальший розвиток термодинамічної моделі, що описує плавлення ультратонкого шару мастила в режимі межового тертя при фазових переходах першого та другого роду дозволяє спрогнозувати поведінку системи при зміні керуючих параметрів та встановити умови за яких відбуваються переходи між сухим, переривчастим та режимом ковзання в трибологічній системі. Установлення умов за яких зникає переривчастий режим, що дозволяє зменшити зношування механізмів, що труться представляє практичне значення для наномеханіки та біоінженерії при розробці штучних суглобів, пристроїв електроніки та ін.

Особистий внесок здобувача. Представлені в роботі результати отримані як особисто автором, так і при співробітництві з науковим керівником – доцентом Ляшенком Я.О. та професором Хоменко О.В. Усі результати дисертаційного дослідження обговорювались з науковим керівником – доц. Ляшенком Я.О.

У роботі [1] автор дисертації приймав участь у вивченні літературних джерел, числовому розв'язанні системи рівнянь, проведенні числового експерименту, а також в обговоренні отриманих результатів.

У роботі [2] дисертантом досліджено поведінку ультратонкого мастила при фазовому переході другого роду і побудовано модифіковану карту тертя.

У роботі [3] здобувач дослідив особливості гістерезису на залежності сили тертя від температури і швидкості зсуву під час плавлення мастила при фазовому переході першого роду.

У роботі [4] здобувач продовжив дослідження сили тертя при наднизьких температурах та надмалих швидкостях зсуву. Змоделював поведінку системи при довготривалій зупинці зовнішнього приводу для мастил, що складаються з алканів різної довжини.

У роботі [5] дисертант модифікував термодинамічну модель плавлення ультратонкого мастила, врахувавши універсальну залежність в'язкості ньютонівських мастил. На основі модифікованої системи побудував нову залежність сили тертя від температури і швидкості зсуву, дослідив поведінку нанотрибологічних систем при сталій та періодичній зовнішній силі.

У роботах [6-10] дисертантом проведений числовий аналіз системи диференціальних рівнянь.

У роботах [11-12] автор дисертації провів аналітичні розрахунки критичних значень температури та швидкості зсуву для термодинамічного потенціалу, який враховує лінійний доданок параметра порядку в розвиненні в ряд вільної енергії.

Тексти статей [5, 6, 8-10] та тез [13-15] повністю підготовлені дисертантом.

Апробація результатів дисертації. Основні наукові та практичні результати роботи оприлюднені та обговорені на таких конференціях: IV, V та VI Міжнародних науково-інноваційних молодіжних конференціях “Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент” (м. Тамбов, Росія, 2012, 2013, 2014 рр.); Конференції молодих вчених і аспірантів Інституту електронної фізики НАН України “ІЕФ-2013” (м. Ужгород, 2013 р.); II та III Міжнародних конференціях “Nanomaterials: Application and Properties (NAP)” (м. Алушта, Крим, Україна, 2013 р.; м. Львів, 2014 р.); 34-й та 35-й Міжнародних конференціях “Electronics and Nanotechnology (ELNANO)” (м. Київ, 2014, 2015 рр.); XIV Всеукраїнській школі-семінарі і конкурсі молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 2014 р.); школі-семінарі “Багатомасштабне

модельовання фізичних процесів у конденсованих середовищах” (Суми, 2014 р.).

Публікації. Основні результати дисертації викладено в 15 публікаціях: 5 статей у фахових виданнях України та закордонних високореєтингових журналах [1-5] із них 4 статті [1-4] індексуються наукометричними базами даних Scopus та Web of Science; 7 статей в матеріалах конференцій [6-12], з яких 2 статті [9,11] обліковуються наукометричними базами Scopus та Web of Science та 3 в збірниках тез конференцій [13-15].

Структура і зміст роботи. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, загальних висновків і списку використаних джерел, у якому міститься 133 найменування на 14 сторінках. Обсяг дисертації становить 126 сторінок, із яких 105 – основний текст, 55 рисунків та 1 таблиці, у тому числі 9 рис. на окремих 6 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтована актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовані мета та основні завдання дослідження, визначені новизна і практичне значення отриманих результатів, вказаний зв'язок дисертації з науково-дослідними роботами, наведені відомості про апробацію отриманих результатів, визначені методи досліджень, особистий внесок здобувача та структура роботи.

Перший розділ роботи “Трибологічні властивості межового тертя (літературний огляд)” складається з трьох підрозділів.

У *першому* підрозділі розглянуто особливості межового режиму тертя. На прикладі закону Амонтона пояснено неможливість застосування класичної теорії для опису цього режиму. Приведені основні моделі пояснення переривчастого stick-slip режиму руху.

У *другому* підрозділі проведено аналіз літературних джерел, наведено експериментальні методи дослідження межового мастила. Основною експериментальною установкою досліджень є апарат поверхневих сил, описано його принцип роботи. Представлені типові залежності сили тертя від часу, температури, швидкості зсуву та часу зупинки зовнішнього приводу.

У *третьому* підрозділі розглянуто теоретичні методи дослідження. Приведено методи молекулярної динаміки та аналітичні моделі. Для феноменологічної моделі Попова наведено коротке виведення формул для опису пружних та в'язких напружень, сили тертя, рівняння руху блока; показано, що дана модель враховує термодинамічне і зсувне плавлення мастила. На основі результатів моделі Карлсона та Батісти пояснено механізм плавлення та тверднення під час stick-slip руху. Показаний теоретично розрахований гістерезис на залежності сили тертя від швидкості зсуву.

Другий розділ дисертації “Термодинамічна модель плавлення ультратонкої плівки мастила” складається з чотирьох підрозділів.

У першому підрозділі наведено систему рівнянь руху при зсуві блока в одному напрямку, який зображено на рис. 1:

$$M\ddot{X} + K\Delta X - F = 0, \quad (1)$$

$$F = A(\sigma_{el} + \sigma_v), \quad (2)$$

де M – маса блока, K – жорсткість пружини, F – сила тертя, що виникає між поверхнями, X – координата блока, ΔX – величина натягнення пружини, A – площа контакту, σ_{el} та σ_v – пружна та в’язка складові повних напружень, крапка над X визначає похідну за часом.

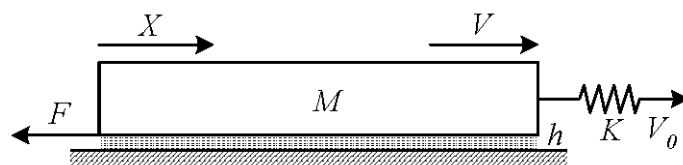


Рис. 1. Спрощений механічний аналог трибологічної системи при сталому зовнішньому впливі

В’язкі напруження визначаються за допомогою моделі:

$$\sigma_v = k \left(\frac{V}{h} \right)^{\gamma+1}, \quad (3)$$

де k – коефіцієнт пропорційності, V – швидкість руху блока, h – товщина мастила, γ – безрозмірний показник, знак якого визначає тип рідини (для псевдопластичних – $\gamma < 0$, ділатантні характеризуються $\gamma > 0$ і у випадку ньютонівських рідин $\gamma = 0$).

У другому підрозділі розглянуто фазовий перехід другого роду. Записано густину вільної енергії у вигляді

$$f = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 + \frac{b}{4}\varphi^4, \quad (4)$$

де φ – параметр порядку, що представляє амплітуду періодичної складової мікроскопічної функції густини середовища, α , a , b – додатні сталі, T – температура мастила, T_c – критична температура, ε_{el} – зсувна компонента пружної деформації.

У цьому випадку пружні напруження, що виникають в системі визначаються через параметр порядку:

$$\sigma_{el} = a\varphi^2 \varepsilon_{el}. \quad (5)$$

І, відповідно, кінцевий вираз для визначення сили тертя можна записати у вигляді:

$$F = \left[\sigma_{el} + k \operatorname{sgn}(V) \left(\frac{|V|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A. \quad (6)$$

де $\operatorname{sgn}(V)$ – знакова функція, що визначає напрям руху блока. Графічне зображення сили представлено на рис. 2.

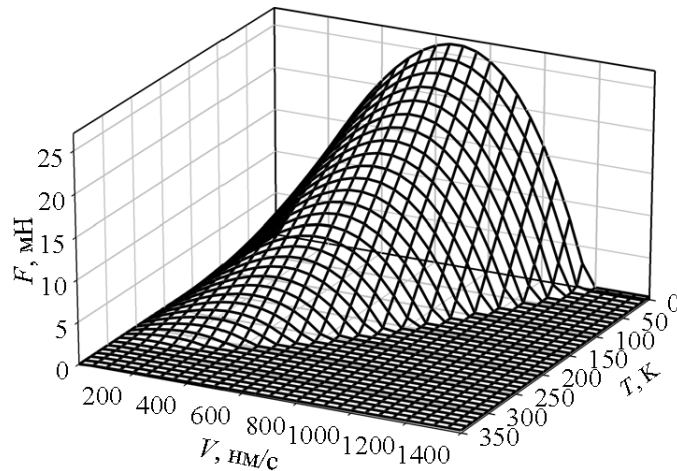


Рис 2. Тривимірна залежність сили тертя $F(V, T)$, яка розрахована на основі співвідношення (6), між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями при наступних параметрах: $T_c = 290$ К; $\alpha = 0,95$ Дж·К⁻¹/м³; $\gamma = -2/3$; $a = 4 \cdot 10^{12}$ Па; $b = 230$ Дж/м³; $h = 10^{-9}$ м; $\tau = 10^{-8}$ с; $A = 0,6 \cdot 10^{-9}$ м²; $k = 5 \cdot 10^4$ Па·с^{1/3}

У третьому підрозділі описано фазовий перехід першого роду. Густина вільної енергії записано у вигляді:

$$f = \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{a}{2}\varphi^2 \varepsilon_{el}^2 - \frac{b}{3}\varphi^3 + \frac{c}{4}\varphi^4. \quad (7)$$

Аналіз термодинамічного потенціалу (7) дозволяє виділити критичні температури плавлення і тверднення мастила:

$$T_{c0} = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h} \right)^2 + \frac{b^2}{8\alpha c}, \quad (8)$$

$$T_c^0 = T_c - \frac{a}{2\alpha} \left(\frac{\tau_\varepsilon V}{h} \right)^2, \quad (9)$$

$$\Delta T = T_{c0} - T_c^0 = \frac{b^2}{8\alpha c}, \quad (10)$$

де ΔT – ширина гістерезису на залежності сили тертя від температури.

Якщо блок зсувати зі сталюю швидкістю V , то ширина гістерезису визначається за формулою (10). Наявність пружини між блоком та зовнішнім приводом суттєво збільшує ширину гістерезису (рис. 3). Це відбувається внаслідок того що, при поступовому збільшенні температури в точці А ($T > T_{c0}$) ще спостерігається переривчастий режим руху, а при зменшенні температури починаючи від рідиноподібного стану мастила при цій самій температурі (точка Б) спостерігається режим рідинного ковзання.

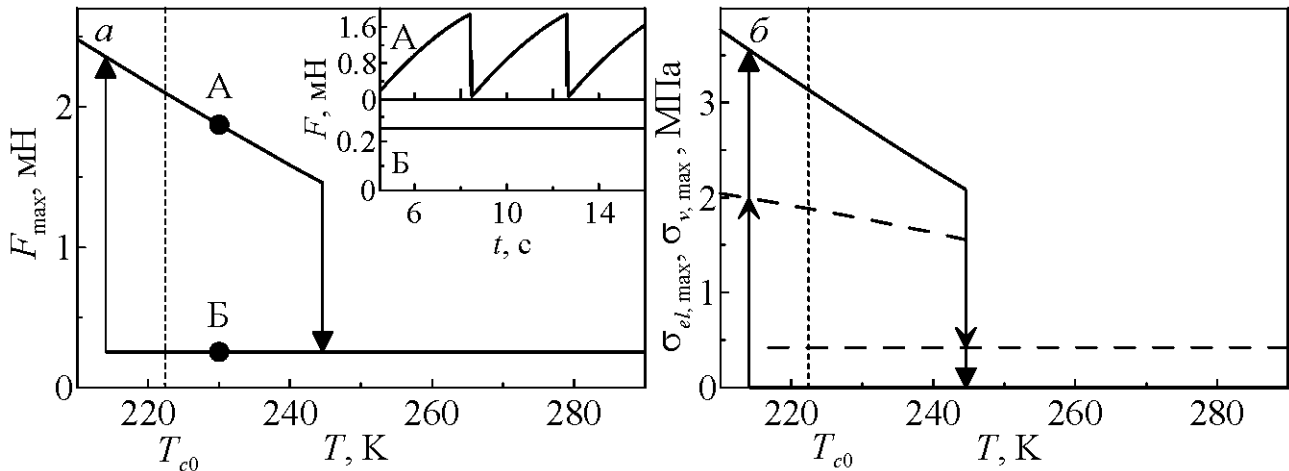


Рис. 3. Залежність максимальних значень сили тертя F_{max} (а), пружних $\sigma_{el,max}$ (суцільна лінія) та в'язких $\sigma_{v,max}$ (штрихова лінія) напружень (б) від температури T в трибологічній системі при сталому зовнішньому впливі з параметрами, що були використані при отриманні залежностей, які представлені на рис. 2, та $c = 850 \text{ Дж/м}^3$; $M = 0,4 \text{ кг}$; $K = 1000 \text{ Н/м}$; $V_0 = 600 \text{ нм/с}$

У четвертому підрозділі розглядається інший аналог трибологічної системи (рис. 4). Два блоки перебувають один на одному. Верхній блок приводиться в рух за циклічним законом, а нижній – знаходиться на роликах та затиснутий між двома пружинами. За наявності ультратонкого мастила між поверхнями блоків можлива реалізація різних режимів тертя.

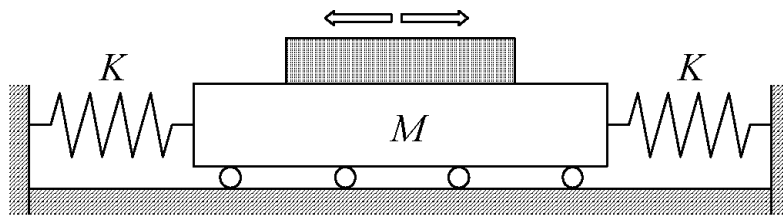


Рис. 4. Спрощений механічний аналог трибологічної системи при періодичному зовнішньому впливі

Рівняння руху зовнішнього приводу записуються у вигляді:

$$X = X_m \cos \omega t, \quad (11)$$

$$V = -X_m \omega \sin \omega t, \quad (12)$$

де X_m – амплітуда, ω – циклічна частота. Типова поведінка такої системи зображена на рис. 5.

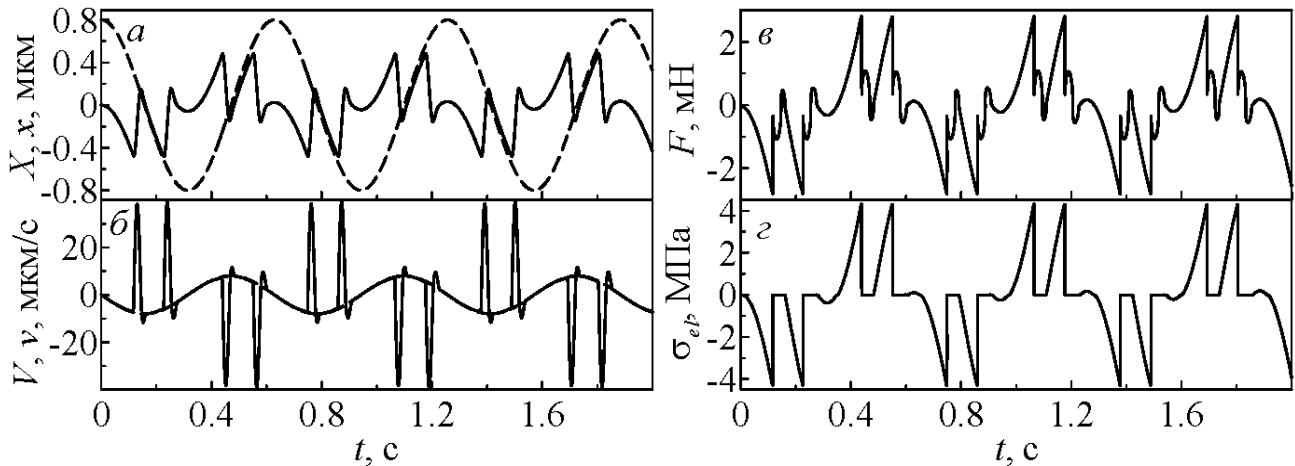


Рис. 5. Залежності координат верхнього X (штрихова лінія) та нижнього x (суцільна крива) блоків (а), швидкостей верхнього V (штрихова лінія) та v (суцільна лінія) блоків (б) пружних напружень σ_{el} (в) і сили тертя F (г) в трибологічній системі при періодичному зовнішньому впливі від часу t з параметрами, що були використані при отриманні залежностей, які представлені на рис. 3, та $T = 200$ К; $X_m = 0,8 \cdot 10^{-6}$ м; $\omega = 10$ рад/с; $K = 3000$ Н/м

Проведений числовий експеримент для трьох типів рідин, який показує, що мінімальне значення сили тертя має псевдопластична рідина (рис. 6, а).

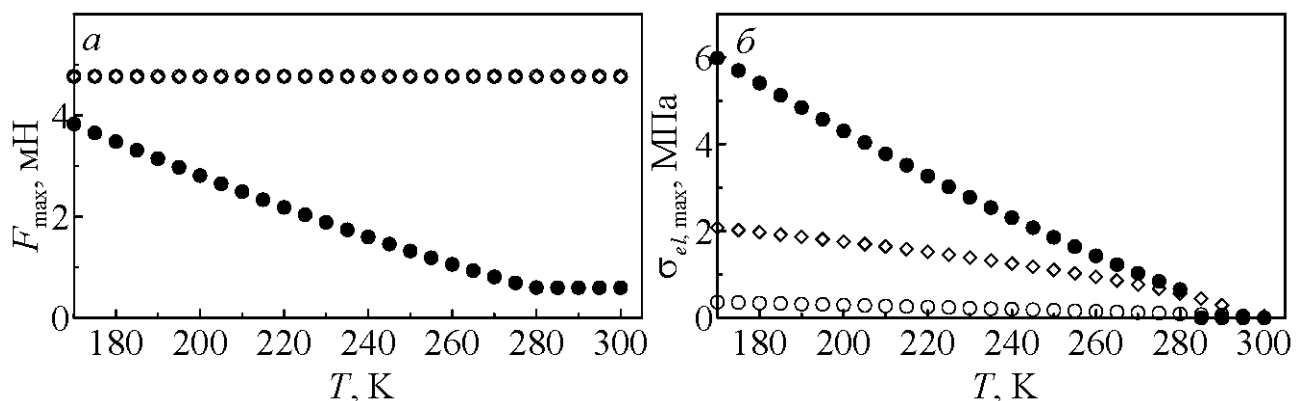


Рис. 6. Залежність амплітудних значень сили тертя F_{max} (а) та пружних напружень $\sigma_{el, max}$ (б) від температури T в трибологічній системі при періодичному зовнішньому впливі з параметрами, що були використані при побудові залежностей, які представлені на рис. 5, у випадках псевдопластичної (\bullet), ньютонівської (\diamond) та ділатантної (\circ) рідини

Навіть за умови максимальних значень пружних складових напружень серед розглянутих рідин (рис. 6, б). При збільшенні коефіцієнта пропорційності k між в'язкістю та градієнтом швидкості (формула (3)) мастила пружні напруження для псевдопластичних мастил залишаються сталими, а максимальна сила тертя зростає. Для ділатантних та ньютонівських мастил пружні напруження монотонно спадають, а сила тертя залишається сталою. При збільшенні жорсткості пружини для ділатантних та ньютонівських мастил максимальні сила тертя і напруження зростають, а для псевдопластичних – зростають до певного значення, після чого залишаються сталими.

Третій розділ дисертації “Врахування універсальної залежності в'язкості від температури та градієнта швидкості” складається із трьох підрозділів.

У *першому* підрозділі враховано температурну залежність в'язкості для полімерних ланцюгових молекул вуглеводнів, які у своєму складі мають 20, 100 та 1400 атомів вуглецю, у вигляді:

$$\eta_{eff} = 10^C (\dot{\epsilon})^{-n}, \quad (13)$$

$$n = \frac{1}{1 + (T / T_k)^\beta}, \quad (14)$$

$$C = 10,9n - 3,8, \quad (15)$$

де параметри T_k , β залежать від типу використовуваного полімеру та визначаються експериментально. Враховуючи (13)-(15), сила тертя (6) переписеться у вигляді

$$F = \left[\sigma_{el} + \operatorname{sgn}(V) 10^{10,9n-3,8} \left(\frac{|V|}{h} \right)^{1-n} \right] A. \quad (16)$$

Аналіз виразу (16) показує, що зі зменшенням швидкості сила тертя також спадає, однак при температурі $T = 0$ сила тертя F при будь-яких швидкостях зсуву $V < 1$ нм/с приймає одне і теж фіксоване значення:

$$\lim_{V \rightarrow 0; T \rightarrow 0} F(V, T) = 10^{7,1} A. \quad (17)$$

У *другому* підрозділі розглянуто ковзання після довготривалої зупинки зовнішнього приводу (рис. 7).

При низьких температурах під час зсуву блока відбувається вихід системи на стаціонарний режим функціонування у режимі сухого тертя. Зупинка зовнішнього приводу приводить до релаксації сили тертя. Після повторного увімкнення зовнішнього приводу в системі знову установлюється режим сухого

тертя. З підвищенням температури T на початковому етапі встановлюється переривчастий рух, який змінюється релаксацією до ненульового значення сили тертя, після чого знову реалізується stick-slip рух. З перевищенням температурою критичного значення в системі реалізується режим рідинного тертя.

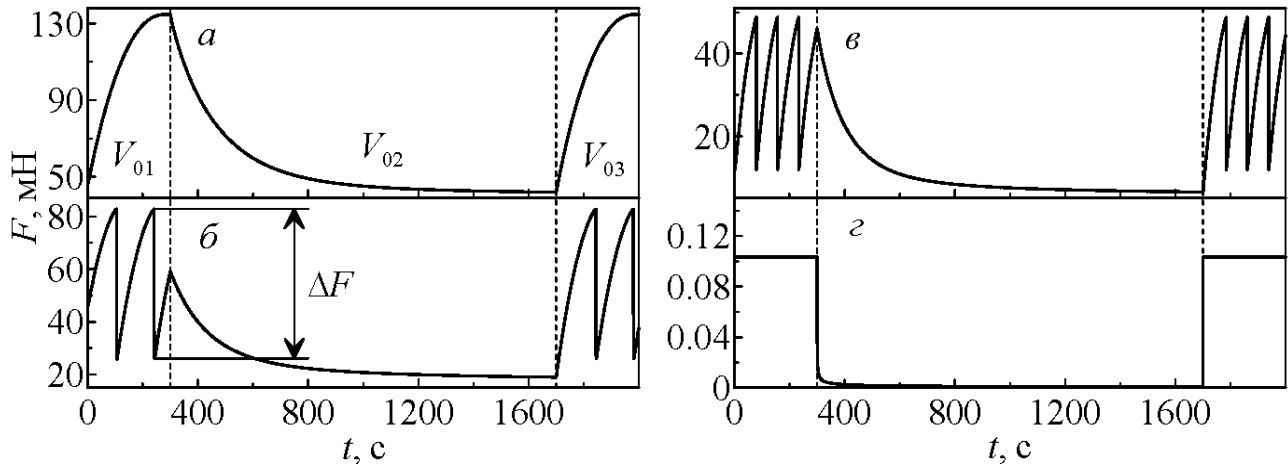


Рис. 7. Залежність сили тертя F від часу t в трибологічній системі при сталому зовнішньому впливі з параметрами, що були використані при отриманні залежностей, які представлені на рис. 2, та $M = 0,4$ кг; $K = 3000$ Н/м; $V_{01} = 500$ нм/с; $V_{02} = 0$ нм/с; $V_{03} = 500$ нм/с; $T_k = 353$ К; $\beta = 4,09$ та температурах T , К: а – 130; б – 170; в – 200; г – 300

Збільшення площі контакту поверхонь, що можна умовно вважати як підвищення навантаження на систему приводить до зменшення частоти фазових переходів та зростання максимальних значень сили тертя.

У третьому підрозділі розглянуто вплив довжини полімерних молекул, з яких складається мастило, на характер тертя. Показано, що для алканів найбільшої довжини переривчастий режим тертя змінює рідиноподібне тертя при менших температурах, ніж для більш коротких полімерних молекул. Але зі зростанням температури мастила відбувається перехід мастила в рідиноподібний стан і зменшується висота піка на залежності $F(t)$ при повторному увімкненні зовнішнього приводу.

При збільшенні швидкості зсуву перехід від переривчастого руху до рівномірного ковзання відбувається для найкоротших алканів при менших значеннях швидкості V , ніж для довших полімерів.

Четвертий розділ дисертації “Кінетика та ефекти пам’яті при несиметричному потенціалі” складається з чотирьох підрозділів.

У першому підрозділі записана густина вільної енергії з врахуванням лінійного доданку параметра порядку у вигляді:

$$f = -a\varphi + \alpha(T - T_c)\varphi^2 + \frac{b}{2}\varphi^2\varepsilon_{el}^2 - \frac{c}{3}\varphi^3 + \frac{d}{4}\varphi^4. \quad (18)$$

Аналіз термодинамічного потенціалу (18) дав змогу виділити критичні температури і швидкості плавлення і тверднення мастила:

$$T(\varphi_0) = T_c + \frac{1}{2\alpha} \left(\frac{a}{\varphi_0} - b \left(\frac{V\tau_\varepsilon}{h} \right)^2 + c\varphi_0 - d\varphi_0^2 \right), \quad (19)$$

$$V(\varphi_0) = \frac{h}{\tau_\varepsilon} \sqrt{\frac{a}{b\varphi_0} + \frac{2\alpha(T_c - T) + c\varphi_0 - d\varphi_0^2}{b}}, \quad (20)$$

$$\varphi_0^3 - \frac{c}{2d}\varphi_0^2 + \frac{a}{2d} = 0, \quad (21)$$

де кількість розв'язків (19) та (20) залежить від кількості додатних коренів рівняння (21). Для визначення кількості останніх введено функцію:

$$g = c^3 - 27ad^2. \quad (22)$$

При значенні $g > 0$ рівняння (21) має три різних дійсних корені, при чому два додатні та один від'ємний, який відкидається, оскільки він не має фізичного змісту. Дана ситуація відповідає реалізації фазового переходу першого роду, оскільки критичні значення плавлення і тверднення різні. При $g = 0$ маємо три дійсні корені – два кратні додатні і один від'ємний, і в системі відбувається фазовий перехід другого роду, оскільки критичні значення збігаються. В останньому випадку при $g < 0$ маємо один дійсний від'ємний і два комплексно-спряжених корені з додатною дійсною частиною, що також відповідає фазовому переходу другого роду. У подальшому дослідженні розглядається випадок фазового перетворення першого роду.

У *другому* підрозділі розглядається залежність сили тертя від температури та швидкості зсуву поверхонь при фазовому переході першого роду (рис. 8). Показана відмінність між критичними значеннями плавлення і тверднення мастила.

У *третьому* підрозділі досліджується кінетика трибологічної системи за допомогою релаксаційного рівняння Ландау-Халатнікова:

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = -\frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad (23)$$

де τ_φ відіграє роль часу релаксації параметра порядку. Представлені розрахунки часової еволюції параметрів системи. Показано, що для такого потенціалу також можливе встановлення переривчастого руху за рахунок реалізації фазових переходів в твердоподібній плівці мастила.

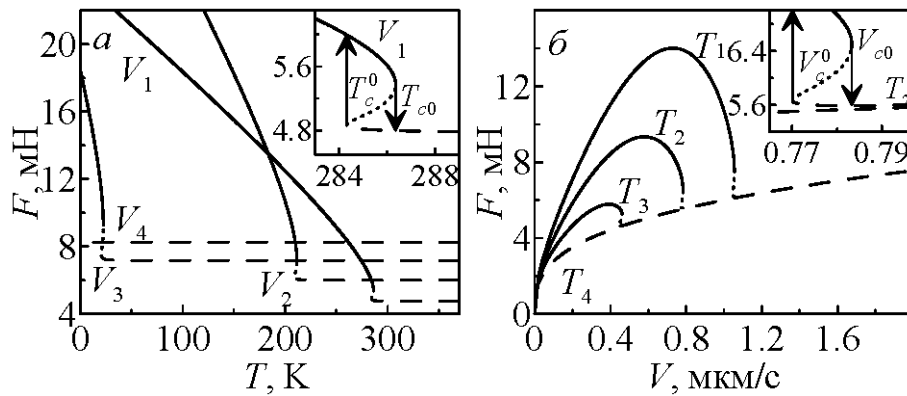


Рис. 8. Залежність сили тертя F від температури T (а) та швидкості зсуву V (б) між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями з параметрами, що були використані при побудові залежностей, які представлені на рис. 3, та $d = 1400$ Дж/м³. Значення швидкості зсуву $V_{1-4} = 0,5; 1,0; 1,7; 2,6$ мкм/с та температури мастила – $T_{1-4} = 200; 250; 270; 320$ К відповідно

У четвертому підрозділі досліджується вплив квазістатичної сили тертя. Побудовані залежності сили тертя від часу для різних температур мастила при довготривалій зупинці зовнішнього приводу. Показано режими у яких після повторного увімкнення зовнішньої сили на цій залежності реалізується один пік. Результати розрахунків добре корелюють з експериментальними даними.

Отримана залежність сили тертя від часу для різних часів релаксації параметра порядку τ_ϕ та для різної тривалості зупинки зовнішнього приводу (рис. 9).

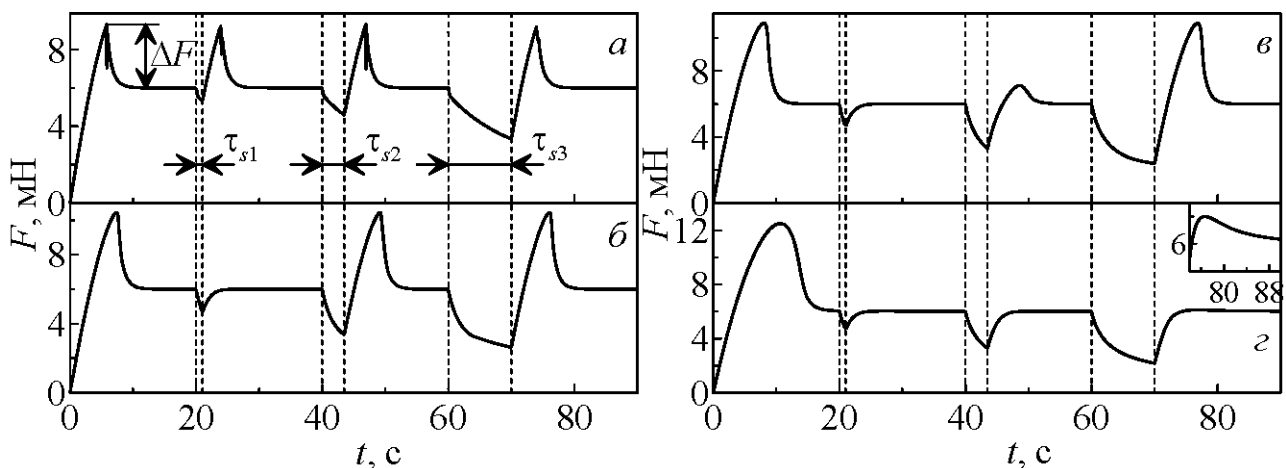


Рис. 9. Залежність сили тертя F від часу t в трибологічній системі при сталій зовнішній дії з параметрами, що були використані при отриманні залежностей, які представлені на рис. 6, та $T = 250$ К; $V_0 = 1$ мкм/с та значеннях часу релаксації параметра порядку τ_ϕ , Дж·с/м³: а – 0,01; б – 100; в – 200; г – 1000 і часу зупинки зовнішнього приводу $\tau_{s1-3} = 1; 3,5; 10$ с

До першої штрихової лінії на всіх панелях представлений вихід системи на стаціонарний режим рідинного тертя. У моменти часу $t = 20; 40; 60$ с зовнішній

привід зупиняється на час $\tau_s = 1; 3,5; 10$ с, відповідно, після чого його знову приводять в дію. З рисунка видно, що зі зростанням часу релаксації параметра порядку τ_φ , на залежностях $F(t)$ зменшується висота піка для однакових часів зупинки зовнішнього приводу. Це обумовлено тим, що мастило твердне частково за період зупинки.

ВИСНОВКИ

Основні результати дисертації представлені наступними висновками:

1. На основі теорії фазових переходів Ландау першого роду проведено подальшу модифікацію термодинамічної моделі плавлення ультратонкої плівки мастила, що затиснута між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями. Показано, що в широкому діапазоні параметрів окрім двох кінетичних режимів рідиноподібного та твердоподібного тертя стає можлива реалізація переривчастого режиму руху, при якому мастило періодично плавиться і твердне. Показано, що при збільшенні швидкості зсуву зовнішнього приводу в системі збільшується частота фазових переходів між рідиноподібним і твердоподібним станами. З'ясовано, що з перевищенням температурою мастила або швидкістю зсуву блока критичних значень переривчастий режим зникає і встановлюється кінетичний режим ковзання зі сталою швидкістю.

2. Показано, що за наявності пружини в трибологічній системі гістерезис на залежності сили тертя від температури і швидкості мають різні властивості. Так, гістерезис на залежності сили тертя від швидкості зсуву блока при обраних параметрах системи можливий лише при дуже повільному збільшенні швидкості вільного кінця пружини, коли швидкість блока в твердоподібному стані мастила буде встигати релаксувати до значення швидкості вільного кінця пружини.

3. У результаті дослідження впливу температури мастила, коефіцієнта жорсткості пружини і коефіцієнта пропорційності k між в'язкістю та градієнтом швидкості на поведінку простого механічного аналогу трибологічної системи при періодичній зовнішній дії встановлено, що для псевдопластичних рідин з ростом температури мастила пружні напруження і сила тертя в системі зменшуються. Виявлено, що при збільшенні коефіцієнта жорсткості пружини сила тертя і напруження зростають для всіх типів мастил та при зростанні коефіцієнта пропорційності k для псевдопластичних рідин максимальні напруження суттєво не змінюються, а сила тертя зростає.

4. У рамках моделі фазового переходу другого роду враховано залежність в'язкості полімерних мастил від температури і градієнта швидкості. Побудована залежність сили тертя від часу при довготривалій зупинці зовнішнього приводу. Установлено, що перехід між режимами сухого, переривчастого і рідинного тертя відбувається при підвищенні швидкості

зсуву зовнішнього приводу і/або температури мастила, а також, що переривчастий режим зникає при використанні алканів більшої довжини при нижчих температурах, ніж при використанні коротких алканів. Тому мастила з більшою в'язкістю сприяють меншому зношуванню поверхонь тертя (раніше зникає stick-slip режим).

5. Урахований лінійний доданок у розкладенні термодинамічного потенціалу в ряд за степенями параметра порядку. Використання модифікованого розкладу вільної енергії дозволяє описати наявність в системі квазістатичної компоненти сили тертя. При аналізі термодинамічного потенціалу визначено співвідношення між параметрами, за яких реалізуються фазові переходи першого або другого роду, в тому числі знайдено критичні значення температур і швидкостей плавлення та тверднення мастила, для фазових переходів першого та другого родів.

6. Установлено, що збільшення площі контакту, що можна умовно вважати як різне навантаження на трибологічну систему приводить до зростання максимальних значень сили тертя та зменшення частоти фазових переходів. Отримані результати розрахунків якісно співпадають з експериментальними роботами інших авторів та теоретичними даними, отриманими за допомогою методів молекулярної динаміки.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Ляшенко Я. О. Переривчастий режим межового тертя як фазовий перехід першого роду / Я. О. Ляшенко, **А. М. Заскока** // Укр. фіз. журн. – 2013. – Т. 58, № 1. – С. 92-103.

2. Ляшенко Я. О. Плавлення ультратонкої плівки мастила між атомарно-гладкими твердими поверхнями як фазовий перехід другого роду / Я. О. Ляшенко, **А. М. Заскока** // Журн. фіз. досл. – 2013. – Т. 17, № 1. – С. 1002 (7 с.).

3. Lyashenko I. A. Hysteresis behavior in the stick–slip mode at the boundary friction / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, **A. M. Zaskoka** // Tribology Transactions. – 2013. – V. 56, № 6. – P. 1019-1026.

4. Ляшенко Я. А. Учет универсальной зависимости вязкости граничной смазки от температуры и скорости деформации при описании особенностей stop-start-экспериментов / Я. А. Ляшенко, **А. Н. Заскока** // ЖТФ. – 2015. – Т. 85, № 7. – С. 69-76.

5. **Заскока А. Н.** Учет температурной зависимости вязкости неньютоновских смазок в модели граничного трения при фазовом переходе второго рода / А. Н. Заскока, Я. А. Ляшенко // Физ. мезомех. – 2014. – Т. 17, № 2. – С. 93-100.

6. **Заскока А. Н.** Неньютоновское поведение ультратонкой пленки смазки между двумя атомарно-гладкими поверхностями в процессе граничного трения / А. Н. Заскока, Я. А. Ляшенко, А. В. Хоменко // Материалы IV Международной научно-инновационной молодежной конференции [“Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент”], (Тамбов, Россия, 24-26 октября 2012 г.). – Тамбов, 2012. – С. 190-192.

7. Lyashenko I. A. Hysteresis phenomena in the stick-slip motion at the boundary friction mode / I. A. Lyashenko, A. V. Khomenko, **A. M. Zaskoka**, K. S. Zhmaka // Proceedings of the International Conference “Nanomaterials: Application and Properties”. – 2013. – Vol. 2, No 1. – P. 01NTF04 (4 p.).

8. **Заскока А. Н.** Влияние температурной зависимости вязкости на поведение неньютоновских смазок в режиме граничного трения / А. Н. Заскока, Я. А. Ляшенко, Е. С. Жмака // Материалы V Международной научно-инновационной молодежной конференции [“Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент”], (Тамбов, Россия, 31 октября – 1 ноября 2013 г.). – Тамбов, 2013. – С. 280-282.

9. **Zaskoka A.** Boundary friction thermodynamic model of ultrathin lubricant film confined between two atomically smooth solid surfaces / A. Zaskoka, I. Lyashenko // Proceedings of the International Scientific Conference [“Electronics and Nanotechnology”], (Kyiv, 15-18 April 2014). – Kyiv, 2014. – P. 219-222.

10. **Zaskoka A. M.** The viscosity temperature dependence in the boundary friction model under a periodic external action / A. M. Zaskoka, I. A. Lyashenko // Proceedings of the International Conference “Nanomaterials: Application and Properties”. – 2014. – Vol. 3, No 1. – P. 01NTF18 (3 p.).

11. Lyashenko I. Interrupted mode of the boundary friction in the model of shear melting with asymmetric potential / I. Lyashenko, **A. Zaskoka** // Proceedings of the International Scientific Conference [“Electronics and Nanotechnology”], (Kyiv, 21 - 24 April 2015). – Kyiv, 2015. – P. 252-255.

12. **Заскока А. Н.** Определение критических температур плавления и затвердевания смазки в режиме граничного трения при фазовых переходах первого и второго рода / А. Н. Заскока, Я. А. Ляшенко, Е. С. Жмака // Материалы VI Международной научно-инновационной молодежной конференции [“Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент”], (Тамбов, Россия, 29 - 31 октября 2014 г.). – Тамбов, 2014. – С. 281-283.

13. **Заскока А. М.** Дослідження явищ гістерезису в нанотрибологічних системах / А. М. Заскока, Я. О. Ляшенко, О. В. Хоменко, І. О. Бережна // Програма і тези доповідей Міжнародної конференції молодих учених і аспірантів [“ІЕФ-2013”], (Ужгород, 20-23 травня 2013 р.). – Ужгород, 2013. – С. 230.

14. **Заскока А.** Дослідження стійкості стаціонарних режимів та просторової неоднорідності мастила в моделі межового тертя / А. Заскока, Я. О. Ляшенко // Збірка тез XIV Всеукраїнської школи-семінару та конкурсу молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини (Львів, 4-6 червня 2014 р.). – Львів, 2014. – С. 35.

15. **Заскока А. М.** Моделювання кінетичних явищ межового тертя в рамках моделі фазового переходу першого роду / А. М. Заскока, Я. О. Ляшенко // Збірка тез школи-семінару [“Багатомасштабне моделювання фізичних процесів у конденсованих середовищах”], (Суми, 21-22 жовтня 2014 р.). – Суми, 2014. – С. 24.

АНОТАЦІЯ

Заскока А. М. Фазові переходи в ультратонких твердоподібних плівках мастила при межовому терті. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Сумський державний університет, Суми, 2015.

Дисертацію присвячено дослідженню процесів межового тертя в рамках термодинамічної моделі плавлення ультратонкого мастила, затиснутого між двома атомарно-гладкими твердими поверхнями. Описано поведінку двох простих механічних аналогів трибологічних систем – при зсуві верхньої поверхні тертя в одному напрямку та при зовнішньому знакозмінному впливі. Установлено, що залежно від керуючих параметрів мастила можуть реалізуватись режими сухого, переривчастого та рідинного тертя.

Проведена модифікація термодинамічного потенціалу, яка дала змогу описати фазові переходи першого роду в системі. Показано, що наявність пружної взаємодії між блоком та зовнішнім приводом суттєво змінює гістерезис на залежності сили тертя від температури та швидкості зсуву.

Проведено врахування універсальної залежності в'язкості неньютонівського мастила від температури та градієнта швидкості. При цьому досліджено властивості мастила при низьких температурах і швидкостях зсуву. За допомогою врахування залежності в'язкості від температури та градієнта швидкості вдалося описати квазістатичну компоненту сили тертя. Змодельовано ефекти пам'яті межового мастила.

Проведено подальшу модифікацію термодинамічного потенціалу, а саме враховано лінійний доданок в розвиненні вільної енергії. Розраховано критичні значення плавлення і тверднення мастила в цьому випадку для фазових переходів першого та другого родів. Знайдено співвідношення між параметрами розкладення при яких в системі реалізується фазовий перехід

першого роду, і при яких – другого. Отримані результати розрахунку якісно співпадають з експериментальними даними інших авторів.

Ключові слова: ультратонка плівка мастила; переривчастий режим тертя; фазовий перехід; пружні та в'язкі напруження; термодинамічний потенціал; зсувне плавлення; гістерезис; ефекти пам'яті.

АННОТАЦІЯ

Заскока А. Н. Фазовые превращения в ультратонких твердоподобных пленках смазки при гарничном трении. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. – Сумский государственный университет, Сумы, 2015.

Диссертация посвящена исследованию процессов граничного трения в рамках термодинамической модели плавления ультратонкой пленки смазки, зажатой между двумя атомарно-гладкими твердыми поверхностями. Плавление и затвердевание смазки описываются как фазовые переходы первого и второго рода. Описано поведение двух механических аналогов трибологических систем – при сдвиге верхней поверхности в одну сторону и при внешнем знакопеременном воздействии. Показано, что в зависимости от параметров системы возможна реализация режимов сухого, прерывистого и жидкостного трения. Выяснено, что увеличение температуры смазки и/или скорости сдвига приводит к уменьшению максимальных значений силы трения. Изучено влияние коэффициента пропорциональности между вязкостью и скоростью сдвига, коэффициента жесткости пружины, циклической частоты, различных типов смазок (псевдопластических, дилатантных и ньютоновских) на поведение трибологических систем.

Анализ термодинамического потенциала позволил выделить критические значения температур плавления и затвердевания смазки, которые совпадают при реализации в системе фазового перехода второго рода, и различны при протекании фазового перехода первого рода. Установлено, что ширина гистерезиса по температуре значительно увеличивается при наличии пружины между блоком и внешним приводом. Гистерезис по скорости сдвига в таком случае отсутствует.

Проведен учет универсальной зависимости вязкости полимерных смазок от температуры и градиента скорости. Эта зависимость показывает, что логарифм эффективной вязкости пропорционален логарифму скорости сдвига. Коэффициент пропорциональности изменяет свое значение от 1 в твердоподобном состоянии до 0 в жидкоподобном (ньютоновская жидкость). При этом исследованы свойства смазки при низких температурах и скоростях

сдвига. Построена трехмерная зависимость силы трения от температуры и скорости сдвига. С помощью учета зависимости вязкости от температуры и градиента скорости удалось описать квазистатическую компоненту силы трения. Построена зависимость силы трения от времени при продолжительной остановке внешнего привода. Смоделированы эффекты памяти граничной смазки, которые проявляются в том, что поведение системы в последующий момент времени зависит от предыдущего состояния. Изучено поведение при различных значениях внешней нагрузки. Построены зависимости для параметров смазок, состоящих из алканов различной длины, продемонстрированы и объяснены отличия для различных типов смазок.

Проведена дальнейшая модификация термодинамического потенциала путем учета линейного слагаемого в разложении свободной энергии по степеням параметра порядка. Рассчитаны критические значения температуры и скоростей плавления и затвердевания смазки в этом случае для фазовых переходов первого и второго рода. Найдено соотношение между параметрами разложения при которых в системе реализуется фазовый переход первого либо второго рода. Показано, что расплавленному состоянию смазки может отвечать ненулевое значение параметра порядка. Такой вид потенциала дал возможность описать квазистатическую силу трения базируясь на новом подходе. На его основе изучено поведение трибологической системы при различных временах остановки внешнего привода для различных времен релаксации параметра порядка. Полученные результаты расчета качественно совпадают с экспериментальными данными других авторов.

Ключевые слова: ультратонкая пленка смазки; прерывистый режим трения; фазовый переход; упругие и вязкие напряжения; термодинамический потенциал; сдвиговое плавление; гистерезис; эффекты памяти.

ABSTRACT

Zaskoka A. M. Phase transitions in ultrathin solid-like lubricant films at the boundary friction. – Manuscript.

Thesis for a Doctor of Philosophy degree (Ph. D.) in Physics and Mathematics on speciality 01.04.07 – Solid-State Physics. – Sumy State University, Sumy, 2015.

The thesis is devoted to the boundary friction processes investigation using thermodynamic model of ultrathin lubricant melting, which is grabbed between two atomically-smooth solid surfaces. The behavior of two simple mechanical analogues of tribological systems have been described: during the shearing of upper block in one direction and during the external periodical influence. It has been found out that depending on lubricant control parameters, regimes of dry, interrupted and sliding friction can be realized.

Further thermodynamical potential modification allows us to describe first-order phase transition in the system. The presence of the elastic connection between block and external drive significantly changes temperature and shear velocity hysteresis's.

The universal dependence of viscosity of lubricant on temperature and velocity gradient has been taken into consideration. Herewith, the lubricant characteristics have been investigated at the low temperatures and low shear velocities. The quasi-static friction force was described using the viscosity dependence.

The further thermodynamic potential modification has been performed. For this purpose, the linear term was added in the free energy expansion into series. The critical values of lubricant melting and solidification were calculated for the phase transitions of the first- and second-order. The relation was found between expansion parameters for which first- or second-order phase transition are realized in the system. Obtained results qualitatively coincide with experimental data.

Key words: ultrathin lubricant film; stick-slip friction; phase transition; elastic and viscous stresses; thermodynamic potential; shear melting; hysteresis; memory effects.

Підписано до друку __.__.2015.

Формат 60x90/16. Ум. друк. арк. 1,1. Обл.-вид. арк. 0,9. Тираж 100 пр. Зам. №

Видавець і виготовлювач

Сумський державний університет,

вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК №3062 від 17.12.2007.