

539.3, 539.6

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕНИЯ В НАНОКОНТАКТАХ

В.Г. Заводинский, О.И. Каминский

С помощью квантово-механического подхода (теория функционала плотности и метод псевдопотенциала) исследован процесс трения покоя в нанопарах Al-Al, W-W и Al-W в присутствии внешнего давления. Показано, что процесс трения сопровождается процессами деформации и разрушения. Коэффициенты трения для системы Al-Al с увеличением давления уменьшаются, а в случаях W-W и Al-W- увеличиваются.

Ключевые слова: моделирование из первых принципов; нанотрибология; трение покоя; алюминий; вольфрам.

QUANTUM-MECHANICAL STUDY OF THE FRICTION IN NANOCNTACTS

The quantum-mechanical approach (the density functional theory and the pseudopotential method) is used to study the friction in the nano pairs (a rod and a slab) Al-Al, W-W and Al-W. It is shown that the process is accompanied by destruction of the rod and deformation of the slab. The friction coefficients decrease with pressure for the Al-Al system and increased in cases of the W-W, Al-W pairs.

Key words: first-principles modeling; nanotribology; static friction; aluminium; tungsten.

Развитие новых физических методов исследования тонких приповерхностных слоев позволило перейти к изучению трения на уровне элементарных событий в динамических наноконтактах. Очевидно, что переход на атомарный уровень, где важнейшую роль играет квантовая механика, имеет отличие от классического представления трения в макро мире.

В данной работе предлагается исследовать процессы трения покоя, основываясь на квантово-механическом межатомном взаимодействии с использованием физики твердого тела, и тем самым понять его первопричинные механизмы.

Полученные результаты исследования на идеально гладких простых структурах будут полезны для дальнейшего изучения более сложных материалов, очень важных для сегодняшних механизмов и технологий, в которых трение покоя является актуальной проблемой, полученные результаты исследования позволяют также продолжить изучение трения скольжения.

В данной работе исследовано взаимодействие наноразмерных объектов алюминия и вольфрама с целью исследования процесса трения покоя.

Все расчеты, описанные в работе, произведены с помощью программного пакета FHI96md [1, 2], который применяется при изучении механических свойств различных наносистем. Этот пакет основан на теории функционала электронной плотности и методе псевдопотенциала [3]. В данной работе использовались псевдопотенциалы алюминия и вольфрама, построенные с помощью пакета FHI96PP[4] по схеме Труллера – Мартинса [5]. Во всех случаях выполнялась оптимизация атомной геометрии.

Для изучения процесса трения взяты суперъячейки, в которых размещались исследуемые объекты – нанопластина и наностержень; схемы их взаимного расположения приведены на рис. 1. Пластина в подобных задачах используется как поверхность и не является наночастицей. Стержень позволяет избежать недостатков метода периодических граничных условий ввиду удаленности стержня от его трансляции по осям X и Z . Фактически мы моделируем макротело, рассматривая его на атомарном уровне. Реальное число атомов, включенное в компьютерное моделирование, равно 51 для системы Al-Al, 44 – для W-W и 30+18 – для Al-W. Рассматривается идеально гладкая поверхность.

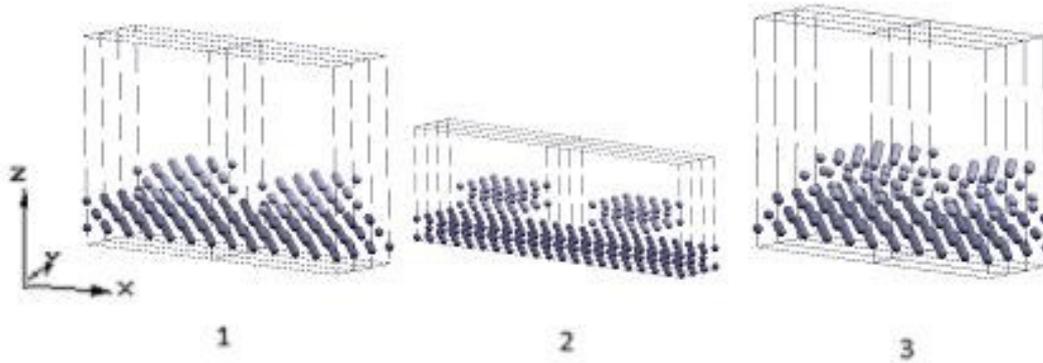


Рис. 1. Стартовые конфигурации исследованных наносистем: 1) Al-Al, 2) W-W, 3) Al-W.

Компьютерный эксперимент состоит в том, что первоначально находится равновесное состояние системы, т.е. расстояние между исследуемыми объектами, при котором ее полная энергия минимальна. Далее производится многократная деформация системы, имитирующая процесс трения, при зафиксированных на своих позициях нижнем слое пластины и двух верхних слоях стержня. На каждом из описанных шагов производится квантово-механический расчет, включая нахождение равновесных позиций атомов и полной энергии системы.

В процессе моделирования полная энергия системы E изменяется, и из ее изменения ΔE можно найти силу, противодействующую движению стержня, т.е. силу $F = \frac{\Delta E}{\Delta x}$. в то же время изменение

энергии выражается через давление $P = \frac{\Delta E}{\Delta z \times S}$.

Таким образом получим: $F = P \times S \times k$, или $k = \frac{\Delta E}{\Delta x \times S \times P}$, где k – коэффициент трения.

На рис. 2 показано изменение атомной структуры системы Al-Al в процессе движения алюминиевого наностержня по алюминиевой нанопластине при различных давлениях. Из рис. 2 следует, что наностержень заметно разрушается за счет сил адгезии: происходит отрыв верхних слоев стержня, в то время как нанопластина лишь слегка деформируется.

На рис. 3 приведены результаты моделирования системы W-W при $P=0$ и при наличии давления, приложенного к стержню в направлении Z , при $P=350$ ГПа, $P=433$ ГПа, $P=610$ ГПа соответственно. Видно, что при увеличении давления в системе W-W возрастает деформация стержня, пластина практически не деформируется.

На рис. 4 приведены результаты моделирования системы Al-W (алюминий-пластина, вольфрам-стержень) при $P=0$ и при наличии давления, приложенного к стержню в направлении Z при $P=0,3$ ГПа, $P=14,8$ ГПа и $P=18$ ГПа соответственно. Видно, что при увеличении давления в системе Al-W увеличивается деформация стержня, с последующим его разрушением, нанопластина слегка деформируется, но не разрушается.

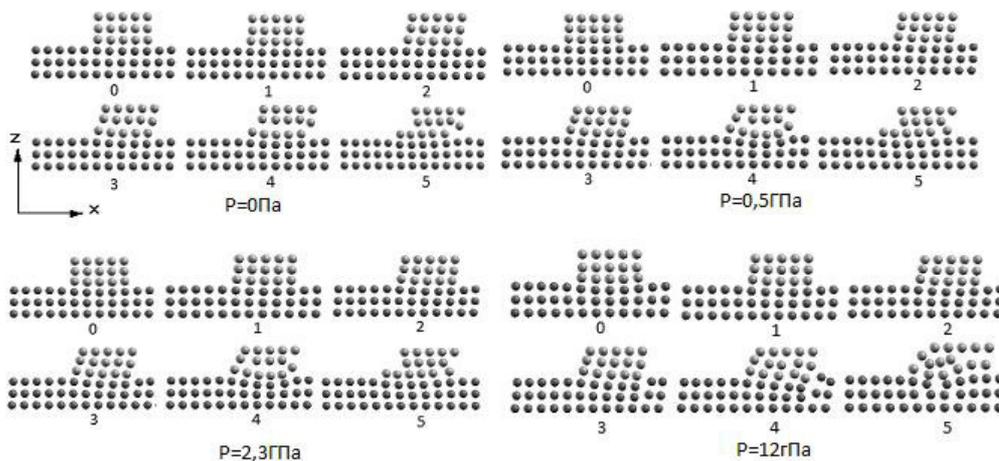


Рис. 2. Изменение атомной структуры системы Al-Al в процессе компьютерного моделирования процесса трения при разном давлении P ; цифрами показаны величины смещения верхнего слоя стержня по оси X в атомных единицах.

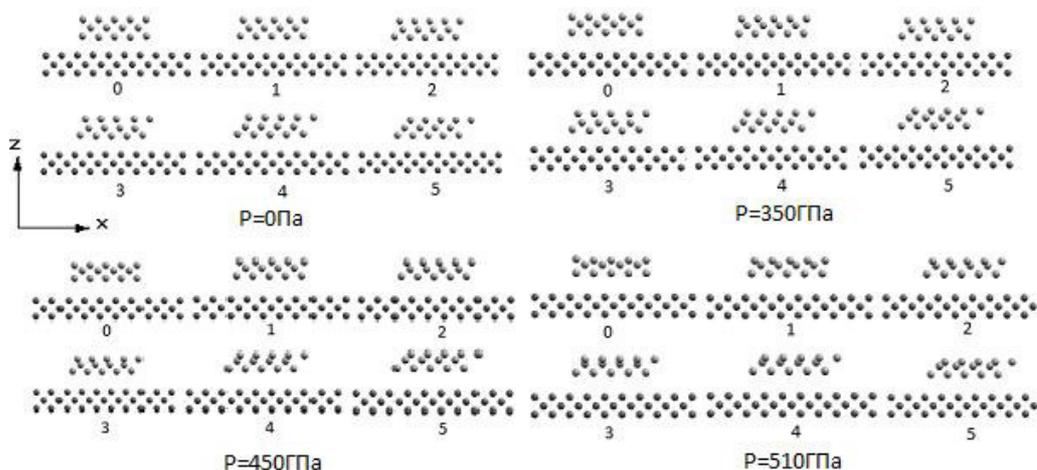


Рис. 3. Изменение атомной структуры W-W в процессе компьютерного моделирования при различных давлениях P .

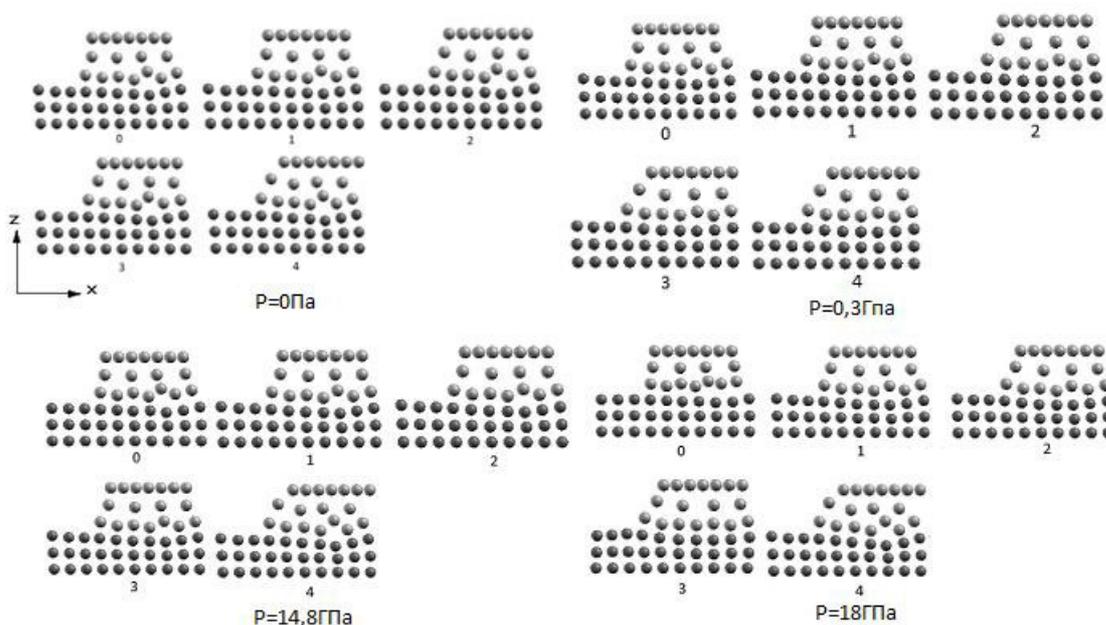


Рис. 4. Изменение атомной структуры Al-W в процессе компьютерного моделирования при различных давлениях P .

На рис. 5 изображено изменение вычисленных коэффициентов трения покоя от сжатия стержня для систем Al-AL, W-W, Al-W.

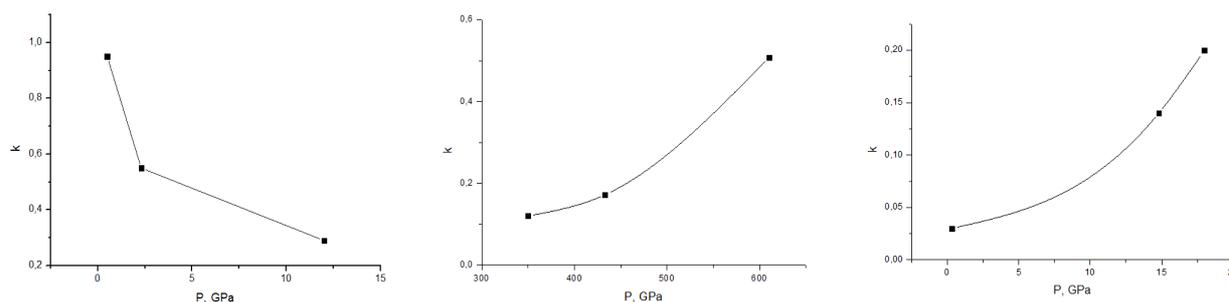


Рис. 5. Зависимость коэффициента трения в системе Al-AL, W-W, Al-W от давления.

Проведенные расчеты позволяют сделать следующие выводы:

1. В процессе трения происходит существенное разрушение стержня, пластина только деформируется, в случае W-W деформация пластины- минимальна.
2. С увеличением давления коэффициент трения в системе Al-AL уменьшается. В системах Al-W, W-W коэффициент трения увеличивается.

1. Beckstedte, M., Kley, A., Neugebauer, J., Scheffler, M. Density functional theory calculations for poly-atomic systems: electron structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamics // Comp. Phys. Commun. – 1997. – V. 107. – P. 187-205.

2. Kratzer, P., Morgan, C.G., Penev, E., Rosa, A.L., Schindlmayr, A. FHI98md Computer code for density- functional theory calculations for poly-atomic systems User's manual, 1999. – 64 p.

3. Cohen, M.L., Heine, V. Pseudopotential theory of cohesion and structure // In: Solid State Physics. – N.Y.: Academic Press, 1970. – V. 24. – P. 250.

4. Fuchs, M., Scheffler, M. Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory // Comp. Phys. Commun. – 1999. – V. 119. – P. 67-165.

5. Troullier, N., Martins, J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // Phys. Rev. B. – 1991. – V. 43. – P. 1993-2006.

УДК 537.226

О.В. Ефимова, Е.В. Стукова, Е.Ю. Королева, Р.В. Суханов

РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В НАНОКОМПОЗИТЕ НА ОСНОВЕ НИТРИТА НАТРИЯ, ВНЕДРЕННОГО В МАТРИЦУ 3D-SBA-15

Исследованы диэлектрические и проводящие свойства нитрита натрия, внедренного в матрицу 3D-SBA-15. Измерения проводились в режиме нагрев – охлаждение. Показано увеличение диэлектрической проницаемости на низких частотах ~ в 10 раз по сравнению с объемным нитритом натрия. Основным механизмом проводимости является термоактивационный механизм, энергия активации для наноразмерного нитрита натрия меньше, чем для объемного.

Ключевые слова: сегнетоэлектрик, диэлектрическая проницаемость, фазовый переход, размерные эффекты.