

带涂层干摩擦阻尼器的分子动力学仿真

樊江, 戴琦晖, 王晋斌, 申秀丽, 胡殿印, 王荣桥
(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191)

摘 要: 从纳米级微凸体间的剪切运动出发研究干摩擦阻尼器摩擦机理。采用更加精确的多体势, 建立描述两个可变形半球状微凸体剪切运动过程的分子动力学模型。应用该模型分析了单晶铜微凸体剪切运动过程中切向力和法向力随相对位移、干涉深度和微凸体半径的变化规律, 同时研究了剪切过程结束后剩余变形能的变化。通过多尺度分析和统计学工具, 建立了干摩擦模型的微凸体模型, 并与实验结果进行对比。研究表明: 单晶铜在真空中发生干摩擦时, 结合面的表面法向接触刚度与法向载荷成正比, 滑动摩擦因数只与表面粗糙度参数有关。计算结果与纯铜摩擦实验结果相吻合, 证明该方法可准确地分析覆盖涂层的干摩擦阻尼器工作面干摩擦特性, 对于已知微观参数的表面, 能够准确地预测滑动摩擦因数。

关 键 词: 阻尼器; 摩擦分析; 分子动力学模拟; 剪切运动; 多尺度分析; 干摩擦模型

中图分类号: V232.4

文献标志码: A

Molecular dynamics simulations of dry friction dampers with coating

FAN Jiang, DAI Qihui, WANG Jinbin, SHEN Xiuli,
HU Dianyin, WANG Rongqiao

(School of Energy and Power Engineering,
Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China)

Abstract: To study and simulate its mechanical characteristics of dry friction process, the shear movement of nanoscale asperities was studied. A molecular dynamics model was created. This model predicted shear movement of two hemispherical deformable asperities by adopting a suitable potential. Shear and normal forces during shear movement of two single-crystal copper asperities were analyzed. The residual deformation energy after the movement was also studied. A dry friction model based on nanoscale asperities was developed through multi-scale analysis and statistical methods. And its results were compared with experimental results. The following conclusions were summarized. In case of dry friction of single-crystal copper in vacuum, the normal contact stiffness on joint surfaces and normal load were in direct proportion, while sliding coefficient of friction was only relevant with surface roughness. The results of simulation were coincident with the results from pure copper friction experiments. This method was proved to be able to analyze dry frictional characteristic of dry friction damper working surfaces covered by wear-resistant coating accurately. For surfaces with known micro parameters, this method can predict the sliding coefficient of friction accurately.

收稿日期: 2017-06-27

作者简介: 樊江(1973—), 男, 副教授, 博士, 主要从事多学科耦合优化设计研究。

引用格式: 樊江, 戴琦晖, 王晋斌, 等. 带涂层干摩擦阻尼器的分子动力学仿真[J]. 航空动力学报, 2018, 33(10): 2333-2342. FAN Jiang, DAI Qihui, WANG Jinbin, et al. Molecular dynamics simulations of dry friction dampers with coating[J]. Journal of Aerospace Power, 2018, 33(10): 2333-2342.

Key words: damper; friction analysis; molecular dynamics simulation; shear movement; multiple-scale analysis; dry friction model

干摩擦阻尼减振结构凭借其结构简单、减振效果明显,在航空发动机中得到了广泛应用。其工作原理是利用干摩擦阻尼面上的摩擦力消耗振动能量,达到减振效果^[1]。因此,对摩擦力的研究一直是干摩擦减振研究的重点之一。由于实际的工程表面并非绝对光滑,摩擦力实际来自于结合面上无数微凸体的剪切运动。现有的摩擦模型主要包括分别从宏观和原子尺度发展的以黏着摩擦理论和修正黏着理论为代表的宏观摩擦理论和以鹅卵石模型为代表的微观摩擦理论^[2]。而航空发动机中干摩擦阻尼器的工作面通常覆盖有耐磨涂层。耐磨涂层使得工作面表面粗糙度可达到数十纳米级别,如采用堆焊工艺得到的 T800 耐磨合金涂层^[3]。对于表面粗糙度达数十纳米的这类表面的剪切运动,宏观摩擦理论所依据的宏观力学已不适用,而这类表面又不接近鹅卵石模型所假设的原子级平坦。因此,急需一种研究方法,从纳米级微凸体间的剪切运动研究干摩擦阻尼器摩擦机理。

分子动力学研究方法将连续介质还原为粒子系统,通过模拟粒子的运动轨迹,对物体的受力与形变展开研究。在纳米尺度干摩擦实验研究手段还不成熟的背景下,纳米摩擦过程的模拟研究,具有不可替代的作用。近年采用分子动力学技术对干摩擦现象所开展的研究中,主要存在两大类模拟形式。第一种是纳米划擦,即纳米级探针在平面基体上划动;另一种是纳米级微凸体剪切,即两个纳米级微凸体发生相对滑动。目前关于纳米划擦的研究开展得较多,研究内容比较完善。文献[4-6]研究了不同的探针在平面基体上的划擦过程,探讨了干涉深度、速度、温度以及探针形状对摩擦特性的影响。而对纳米级微凸体剪切的研究相对较少。文献[7]研究了干涉深度、速度、温度、微凸体形状和晶向等对微凸体摩擦特性的影响,文献[8]研究了滑移速度对微凸体的晶格形变、塑性流动和断裂的影响。

然而,现有的针对纳米级微凸体剪切的研究工作主要采用简单的对势模型——如 Lennard-Jones 势、Morse 势等。这些势函数适用于模拟可变形体与刚体间的相互作用。而在干摩擦阻尼器中,结合面的摩擦本质上是可变形微凸体间的剪切。因此,构建可变形微凸体间相互作用的模型,

采用与之相对应的嵌入原子势函数模型,可更精确模拟干摩擦阻尼器结合面的摩擦。

基于以上分析,本文期望系统地建立可变形微凸体剪切运动的分子动力学模型,深入研究微凸体剪切运动过程中切向力与法向力随切向相对位移的变化过程,研究干涉深度和微凸体半径对剪切过程的影响。通过多尺度分析方法和统计学工具,建立表面粗糙度达到数十纳米级表面的干摩擦模型,并与实验结果进行对比。研究结果对纳观尺度下干摩擦现象的分析方法和干摩擦阻尼减振机理与影响因素具有一定理论与实践指导意义。

1 变形体间剪切的分子动力学模型

1.1 剪切模型

宏观干摩擦运动是由大量微凸体的剪切运动组成的。一方面,对于覆盖有耐磨涂层的结合面,微凸体的尺寸在数十纳米的级别,已进入微观尺度。另一方面,结合面上的黏着力并不是定值。它除了与接触力有关外,还受到形变情况、材料延展性等多种因素的影响^[9]。由于宏观摩擦定律在纳米尺度上不完全适用,这些因素是单纯采用宏观方法难以分析的。因此,为了研究发生在这类结合面上干摩擦问题的微观本质,必须建立起能够准确描述剪切运动的微观尺度模型。假设这些微凸体均为尺寸完全相同的、半径为 R 的半球形^[10],以固定的速率 v 做相对运动,且相对运动的方向矢量通过两半球的球心(如图 1),上下两半球体的干涉深度为 δ 。通过考察下半球体上受到的切向力 F_t 和法向力 F_n ,单对微凸体间剪切运动特性的研究可以成为宏观干摩擦问题研究的基础。

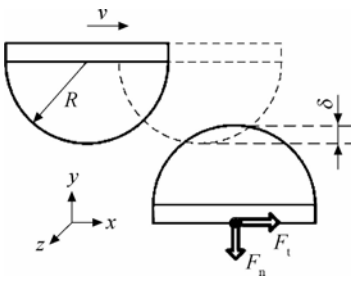


图 1 微凸体剪切过程示意图

Fig. 1 Schematic diagram for shear movement of asperities

建立的分子动力学模型如图 2 所示。每个微凸体由一个半球和一个刚性圆柱形底座构成,组成成分是单晶金属原子。圆柱形底座在模拟过程中不发生位移或整体同时发生位移。半球底层为恒温层,模拟过程中温度保持不变;剩下区域为牛顿层,其运动由牛顿方程来描述。在不失模型代表性的前提下,权衡计算时间后,每个微凸体的直径定为 10 nm 级别。同时,为使两微凸体在初始状态下不受范德瓦耳兹力的作用,以保证模拟的准确性,两微凸体初始水平位置相隔一个微凸体半径。其顶端在 y 轴方向存在固定的干涉深度 δ 。 x 、 y 、 z 轴分别平行于 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 晶向。其中,在 x 和 z 向施加周期性边界条件,在 y 向施加收缩性边界条件,使模型中移动最远的原子总能被包含在边界范围内。模型采用正则系综(NVT),总能量不守恒,与外界有能量交换。系统内粒子数 N 、体积 V 和温度 T 保持不变。采用 Nosé-Hoover 法^[11]使系统与外界保持热平衡。

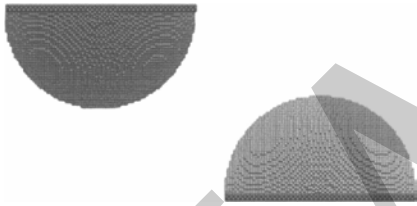


图 2 微凸体剪切过程分子动力学模型图
Fig. 2 Molecular dynamical model for shear movement of asperities

模型中金属原子间作用力选用了嵌入原子势(EAM)^[12]来描述。在 EAM 中,一个金属系统的总聚合能由原子间的对势和将原子嵌入到电子云中的嵌入势两部分组成,如

$$U(r_i) = \sum_i G_i \left[\sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} u(r_{ij}) \quad (1)$$

式中 G_i 是将原子 i 嵌入到一个电子密度是 ρ_j 的由周围原子形成的电子云中所需要的能量, $u(r_{ij})$ 是原子 i 和 j 在距离为 r_{ij} 时的对势。可见,EAM 有效地内在考虑了多体效应,并且能够通过金属材料内部与表面的电子密度差异准确地描述金属材料的性质。因此,EAM 在描述微凸体间的金属原子相互作用时相比其他势函数具有较大优势。

1.2 模拟过程

分子动力学模拟本质上是一个初值问题,选

择一个稳定高效的积分算法是保证准确性的前提。本文采用 velocity-Verlet 算法^[13]对牛顿方程进行时间积分。文献[14-15]指出,如果时间步长大于粒子最高振动频率所对应的周期,那么分子动力学模拟将无法准确地捕捉到所研究系统内的真实情况。考虑到金属原子的最高振动频率主要分布在 6~12 THz 之间,对应的周期是 0.08~0.16 ps。为了使模拟更进一步精确地追踪系统内的真实情况,采用了最小振动周期的 1/10 作为时间步长的上限值。

模拟主要分为两个阶段,弛豫阶段和运动阶段。为了确保运动阶段中微凸体间的作用力尽量少受到其内部原子间不平衡力的影响,在运动开始之前使系统在指定温度下充分弛豫。弛豫过程中采用速度标定法,通过对恒温层内原子的速度直接进行标定,使整个恒温层内的温度保持在期望值附近,并通过恒温层与微凸体其他部分的热量传递来近似描述实际过程中微凸体与基体材料之间的热传导。在运动阶段,两微凸体发生剪切作用。为了模拟微凸体的剪切运动,给定上微凸体底座一个沿 x 轴正向的速度,下微凸体的底座保持固定。当上微凸体到达指定位置时运动停止,模拟结束。

在整个模拟过程中,法向力和切向力分别由下微凸体底座原子集合所受法向力和切向力的合力得到。

2 模拟结果与分析

2.1 模拟参数

航空发动机上广泛采用镍基自润滑层作为高温耐磨涂层^[16-17],但目前对镍原子的分子动力学研究尚不足以支撑模拟。而单晶铜常温下在空气中较难氧化,相比其他金属,其分子动力学模型与实验具有较好的可比性。且镍和铜具有很多相似性。晶体镍和晶体铜都具有面心立方晶体结构(FCC),镍的晶格常数为 0.352 nm,铜的晶格常数为 0.361 5 nm。镍和铜的原子序号分别是 28 和 29,室温下的密度分别是 8.908 g/cm³ 和 8.96 g/cm³,原子半径分别是 124 pm 和 128 pm。因此,本文选择晶体铜作为微凸体的材料。具体的模型参数见表 1。表 1 中的 l 为刚性圆柱形底座的高度。弛豫温度为 300 K,弛豫时间为 5 ps。铜原子间的作用力用 EAM 描述,具体使用了 Foiles 等^[18]拟合的势函数。

表 1 微凸体剪切过程的模拟参数

Table 1 Simulation parameters for shear movement simulation of asperities

参数	数值
微凸体半径 R/nm	7.5
底座高度 l/nm	5
总原子数	229 810
时间步长/ ps	0.002
速度/ $(\text{nm} \cdot \text{ps}^{-1})$	0.1
干涉深度 δ/R	0.1
温度/ K	300

2.2 剪切过程中切向力与法向力的分析

图 3 为剪切过程中两微凸体之间切向力 F_t 随 x 方向相对位移 (x/R) 的变化曲线。其中,下微凸体所受切向力沿 x 轴正向为正,反之为负;当两微凸体球心连线与 y 轴平行时, x 为零;左右两条虚线分别代表两微凸体恰好发生接触和完全脱离时的相对位置。

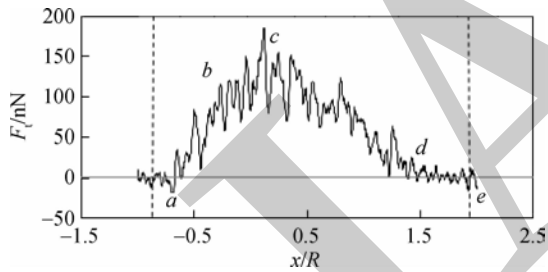


图 3 微凸体剪切过程中的切向力

Fig. 3 Shear force in shear movement of asperities

从图 3 可以看出,微凸体在发生接触以前,切向力在零附近小范围波动。在刚发生接触的 a 点,两微凸体间有微小的吸引力。当剪切运动开始后,切向力在波动中不断增大,直到 c 点附近达到最大值。之后,随着两微凸体继续运动,切向力呈现下降趋势。最终在两微凸体完全脱离以后,切向力再次回到零附近。

图 4 为剪切过程中两微凸体之间法向力 F_n 随 x 方向相对位移 x/R 的变化曲线。其中,下微凸体所受法向力沿 y 轴负方向为正(受压),反之为负;其他规定与图 3 相同。

从图 4 中可以看出,在刚发生接触的 a 点,两微凸体互相挤压,这时主要是结合面上的形变力 F_{de} 发挥作用。随着剪切运动的继续,上微凸体开

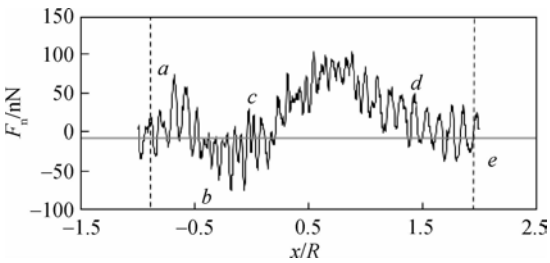


图 4 微凸体剪切过程中的法向力

Fig. 4 Normal force in shear movement of asperities

始向上提拉下微凸体。图 5 解释了这一现象产生的原因:拉力的出现是由于结合面上黏着力作用的增强使结合面上黏着力 F_{ad} 的法向分量大于形变力 F_{de} 的法向分量所致。随着两微凸体的继续运动, F_{ad} 的方向发生顺时针旋转,由提供拉力逐渐变为提供压力,法向力也随之增大。随着两微凸体的逐渐远离乃至脱离,法向力开始下降,最终再次回到零附近。

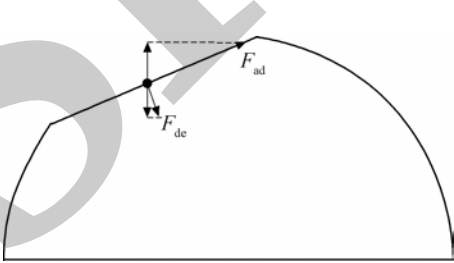


图 5 下微凸体在 b 点的受力分析

Fig. 5 Force analysis for lower asperity at point b

图 6 分别展示了两微凸体处于图 3 和图 4 中的 a 、 b 、 c 、 d 、 e 位置时的变形情况。

切向力和法向力曲线的波动可以通过原子在平衡位置附近的振动和原子间互相碰撞来解释。同时,微凸体表面不能视为几何上的半球面,而是由晶格堆叠形成的阶梯状表面,这是导致切向力

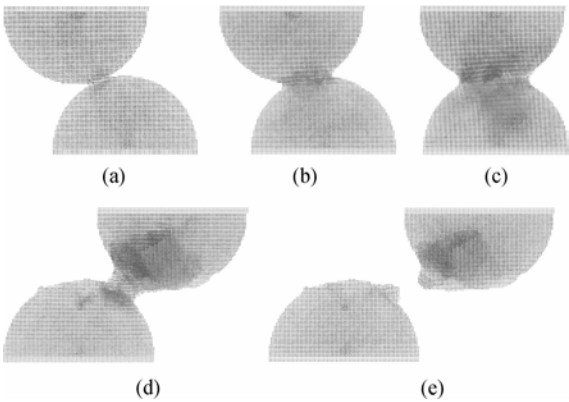


图 6 剪切过程中微凸体的变化

Fig. 6 Deformation of asperities in shear movement

在恰好发生接触和完全分离时刻出现“突跳”现象的原因。

2.3 干涉深度和微凸体半径对剪切过程的影响

为了研究在不同名义正压力和表面粗糙度下的干摩擦问题的微观本质,本文对不同干涉深度和微凸体半径下微凸体的剪切运动进行了研究,选取了比例干涉深度 $\delta/R=0,0.02,0.04,0.06,0.08$ 和 0.1 ,微凸体半径 $R=5,7.5$ nm 和 10 nm 的剪切过程进行模拟。具体模拟参数如表 2 所示。

表 2 不同干涉深度与微凸体半径下剪切过程的模拟参数

Table 2 Simulation parameters for shear movement under different interacting depths and diameters of asperities	
参数	数值
微凸体半径 R/nm	5,7.5,10
总原子数	53 511,229 810,390 907
比例干涉深度 δ/R	0,0.02,0.04,0.06,0.08,0.1
时间步长/ ps	0.002
速度/ $\text{nm} \cdot \text{ps}^{-1}$	0.1
温度/ K	300

图 7 和图 8 比较了不同比例干涉深度和微凸体半径下剪切过程的平均切向力 $F_{t,\text{ave}}$ 和平均法向力 $F_{n,\text{ave}}$ 。从图 7 中可发现,在相同的微凸体半径下,平均切向力与比例干涉深度近似成正比关系。这主要是因为随着比例干涉深度的增加,微凸体间发生相互作用的原子数量成比例增多,这

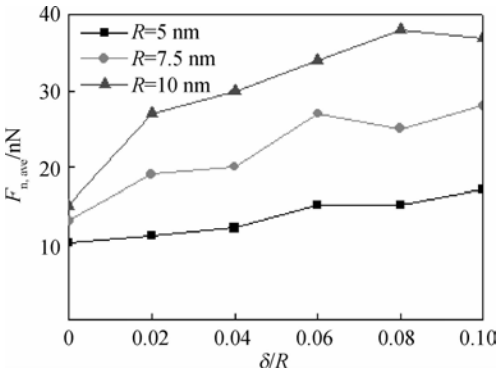


图 8 不同比例干涉深度和微凸体半径下剪切过程的平均法向力

Fig. 8 Average normal force for shear movement under different proportional interacting depths and diameters of asperities

使得微凸体的变形和黏着作用同时成比例地增强,导致平均切向力与比例干涉深度的关系近似成正比。而图 8 则显示,平均法向力与比例干涉深度之间的相关关系不明显。这是由于在剪切运动中法向力表现出先压紧、后提拉、再压紧的特性,比例干涉深度的增加同时增强了提拉作用和压紧作用,因此平均法向力与比例干涉深度的相关关系不明显。从图 7 和图 8 中可发现,平均切向力与平均法向力随微凸体半径的变化相对一致。这是由于随着微凸体半径增大,在相同比例干涉深度下发生相互作用的原子数量增多,从而使微凸体间的作用力增大。

2.4 剪切过程中的能量变化

考虑微观尺度下微凸体的剪切运动,摩擦力所做的总功最终必然有一部分功以剩余变形能(弹性变形能量以及塑性变形能量)的形式储存在各个微凸体中。这种剩余变形能与磨损有关。为了研究剩余变形能与微凸体剪切运动的关系,本节研究了剪切过程中的能量变化。

宏观变形的本质是原子位置的改变。当微凸体发生剪切运动时,一部分原子会永久地离开它们原来的晶格平衡位置并移动到新的位置上,这一过程伴随着旧键的断裂与新键的生成。这种情况引起的势能变化就是剩余变形能。另一部分原子在剪切运动发生时只微小地偏离了它们原来的晶格平衡位置,势能没有改变,没有断开旧键,在剪切运动结束后又回到原平衡位置。这时外界对其做的功将全部转化为原子在平衡位置附近的振动能量,即内能。

本模型采用了正则系综(NVT)。因此,上微

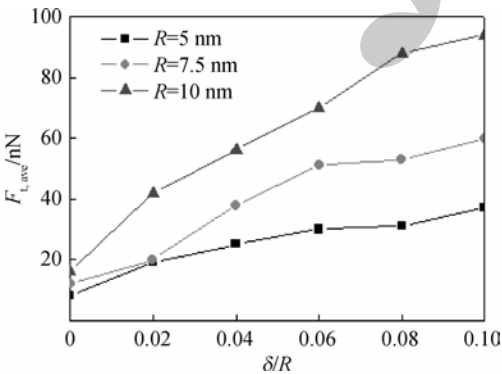


图 7 不同比例干涉深度和微凸体半径下剪切过程的平均切向力

Fig. 7 Average shear force for shear movement under different proportional interacting depths and diameters of asperities

凸体对下微凸体做的总功一部分转化为下微凸体的剩余变形能,另一部分则以热量的形式耗散到体系外。因此,整个剪切运动过程中的能量关系为

$$W_{\text{total}} = \Delta E_p + Q \tag{2}$$

式中 W_{total} 表示上微凸体对下微凸体做的总功,即摩擦总功; ΔE_p 表示体系中总势能的增量,即剩余变形能; Q 为热量。

图 9 和图 10 分别展示了半径 $R=7.5\text{ nm}$ 的微凸体在比例干涉深度 $\delta/R=0.1$ 下发生剪切运动时,系统的总势能 E_p 与切向力累计做功量 W 的变化过程。从图 9 可知,系统的总势能总体上呈先增大后减小的趋势。这说明在剪切过程中,微凸体内部的变形能总体上是先储存后释放的。系统最终的总势能高于初始总势能,两者的差值即为剩余变形能 ΔE_p 。图 10 中切向力累计做功量的曲线变化相对平缓。整个过程中切向力累计做功量即为摩擦总功 W_{total} 。

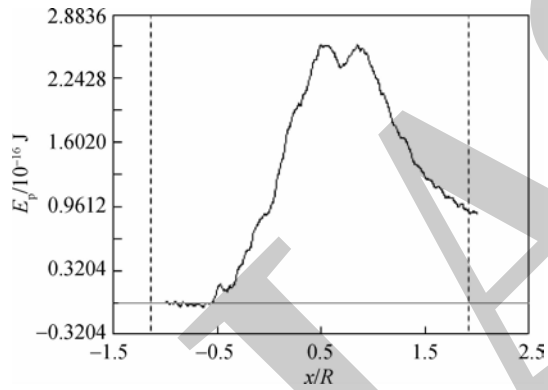


图 9 剪切过程中的总势能

Fig. 9 Total potential energy in shear movement

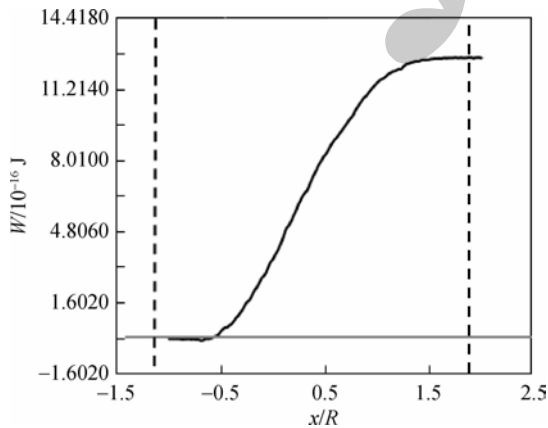


图 10 剪切过程中的切向力累计做功量

Fig. 10 Accumulated work done by shear force in shear movement

图 11 比较了不同比例干涉深度和微凸体半径下完成剪切运动后的剩余变形能。可以发现,剩余变形能基本上与比例干涉深度和微凸体半径呈正相关。这种关系是符合预期的,因为随着比例干涉深度和微凸体半径的增加,微凸体中原子的永久变形会更加严重,这使得剩余变形能增大。

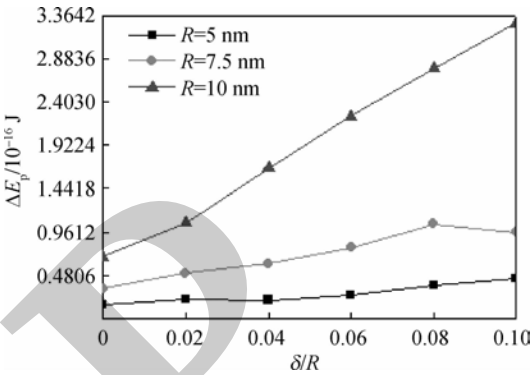


图 11 不同比例干涉深度和微凸体半径下微凸体的剩余变形能

Fig. 11 Residual deformation energy of lower asperity under different proportional interacting depths and diameters of asperities

图 12 比较了不同比例干涉深度和微凸体半径下剩余变形能与摩擦总功的比值。可以发现,该比值与比例干涉深度的关系不明显,而当微凸体半径超过某一阈值后,该比值显著增大。这一结论推广到宏观尺度就是:干摩擦结合面剩余变形能与摩擦总功的比例与名义正压力关系不明显,而与表面粗糙度有存在一定的相关关系。这从侧面印证了表面粗糙度越小,抗疲劳磨损能力越高,当表面粗糙度值小于某一临界值后,表面粗

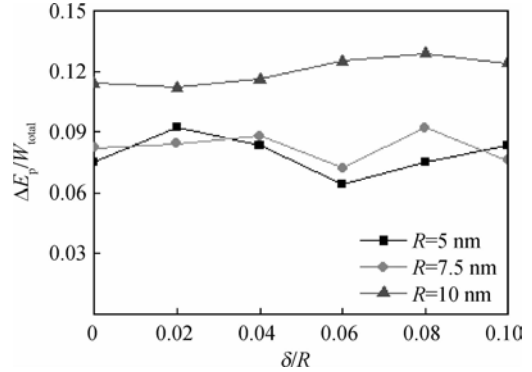


图 12 不同比例干涉深度和微凸体半径下剩余变形能与摩擦总功的比值

Fig. 12 Ratio of residual deformation energy to total frictional total work under different proportional interacting depths and diameters of asperities

糙度对疲劳磨损寿命影响甚微的宏观疲劳磨损性质^[2]。

3 干摩擦的微凸体模型

3.1 一对纳米尺度微凸体剪切过程的力模型

本节将从纳米尺度微凸体的剪切运动规律出发,建立表面粗糙度达到数十纳米级的结合面的宏观尺度干摩擦模型。由于微观力学规律与宏观力学规律不同,在运用统计学工具之前,需要进行多尺度分析。纳米尺度微凸体剪切运动过程与宏观尺度干摩擦过程的最大区别在于表面力作用的增强。

文献[19]指出:当微凸体在有载荷条件下接触时,表面力的作用可以忽略;只有当微凸体在无载荷条件下接触时,表面力才有较小影响。从文中第 2.2 节的切向力模拟结果(见图 3)可以发现,在刚发生接触时,两微凸体间产生了吸引力。这时微凸体可以看作是在无载荷条件下接触。这种吸引力比剪切过程的平均切向力小了一个数量级。导致这种大小差异的原因是表面力和黏着力完全不同的物理本质。对于金属原子,表面力本质上是范德华力,范德华力是一种次作用力。范德华力的作用不通过分子或原子之间的键,因此范德华力对分子或原子的作用很微弱^[9]。

这种表面力会引起两微凸体的“提前”接触,即假想中具有理想外形的两微凸体还没有发生接触时,实际上它们已经借助表面力的作用发生了接触。为了将本文得到的规律从纳米尺度推广到微米尺度,需要重新定义微凸体间的干涉深度和剪切力的零点,即半径为 R 的两微凸体恰好发生“提前”接触时的干涉深度为零,此时平均切向力和法向力也为零。这样,恰好发生“提前”接触的位置便能够对应于微米尺度下的接触起始位置,剪切过程在纳米尺度与微米尺度下具有了一致的规律。根据重新定义的干涉深度、切向力和法向力,对图 7 和图 8 中的坐标轴做相应调整,得到重新绘制的切向力与法向力曲线如图 13 和图 14。

用幂函数分别拟合不同比例干涉深度和微凸体半径下微凸体剪切过程中平均切向力和平均法向力的值,得

$$F'_{t,ave} = 7.062R^2 \left(\frac{\delta'}{R}\right)^{0.9163} \tag{3}$$

$$F'_{n,ave} = 1.013R^2 \left(\frac{\delta'}{R}\right)^{0.4114} \tag{4}$$

式中 $F'_{t,ave}$ 和 $F'_{n,ave}$ 分别为调整后的平均切向力和

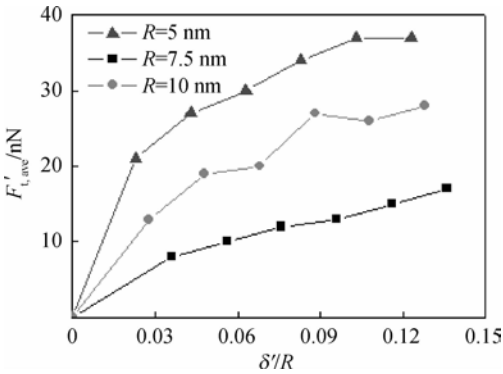


图 13 调整后的平均切向力曲线
Fig. 13 Average shear force curve after adjustment

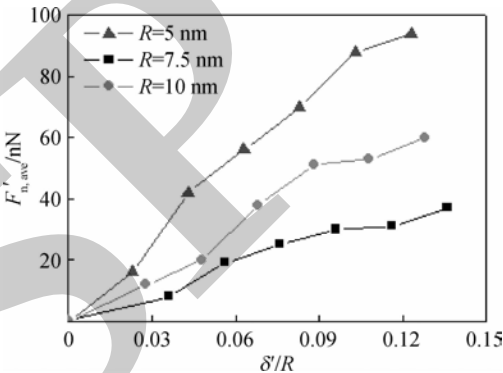


图 14 调整后的平均法向力曲线
Fig. 14 Average normal force curve after adjustment

平均法向力, δ'/R 为调整后的比例干涉深度。这样就得到了把一对纳米尺度微凸体剪切过程推广到微米尺度的力模型。这为建立存在大量纳米尺度微凸体的粗糙表面干摩擦模型提供了基础。

3.2 微凸体呈 Gauss 分布的数十纳米级粗糙表面干摩擦模型

要建立表面粗糙度达到数十纳米级表面的干摩擦模型,需要将模型从微米尺度推广到宏观尺度,首先要对粗糙表面微凸体的分布和各个微凸体所处剪切过程的分布建立统计描述。本文采用了 Greenwood-Williamson(G-W)模型^[20]关于粗糙表面的统计描述以及 Green^[21]关于干摩擦过程的近似假设,具体如下:

- 1) 粗糙表面上分布有大量微凸体,且峰高近似于 Gauss 分布;
- 2) 同一表面上所有微凸体峰顶或至少在峰顶处为具有相同曲率半径的球形;
- 3) 微凸体以确定的数量密度分布。
- 4) 微凸体的剪切运动相互独立;
- 5) 结合面稳定干摩擦阶段,相互剪切的两微

凸体间干涉深度稳定不变;

6) 在结合面干摩擦过程中的任意时刻,同一干涉深度下所有微凸体均匀地处于剪切过程的不同阶段。

其中,假设 1)、假设 2)、假设 3) 确立了对结合面上粗糙表面微凸体分布的统计描述,假设 4)、假设 5) 保证了单对微凸体剪切过程对同一干涉深度下所有其他微凸体剪切过程的代表性,假设 6) 则确立了各个微凸体所处剪切过程分布的统计描述。

在图 15 中,参考平面 1、参考平面 2 分别为上下表面的微凸体平均峰高所在平面, d 可以看做两表面的平均距离。 z_1 、 z_2 分别表示上下两微凸体的高度,分别满足 $z_1 \sim N(0, \sigma_1)$ 和 $z_2 \sim N(0, \sigma_2)$ 。 δ 为两微凸体的干涉深度,其值为 $\delta = z_1 + z_2 - d$ 。那么微凸体相对高度 $z = \delta + d$ 的分布将满足

$$z \sim N(0, \sigma_1 + \sigma_2) \quad (5)$$

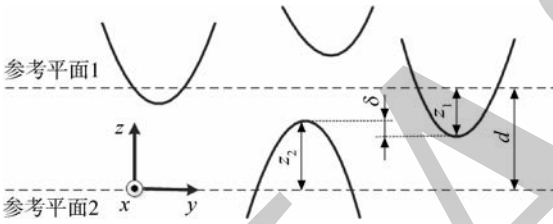


图 15 G-W 模型的示意图

Fig. 15 Schematic diagram for G-W model

设微凸体数密度、名义接触面积分别为 η 、 A_n , 则结合面在干摩擦过程中的切向力(摩擦力)与法向力就可以分别表示为

$$F_t = \eta A_n \int_d^{\infty} F_{t,ave} f(z) dz \quad (6)$$

$$F_n = \eta A_n \int_d^{\infty} F_{n,ave} f(z) dz \quad (7)$$

其中 $f(z)$ 为 z 的概率密度函数。将文中第 3.1 节得到的力模型(即式(3)和式(4))分别代入式(6)和式(7)中,最终得到摩擦力和法向力关于结合面距离 d 与表面粗糙度参数 R 、 σ_1 、 σ_2 的关系式

$$F_t = 7.062 \eta A_n R^2 \left(\frac{1}{R} \right)^{0.9163} \int_d^{\infty} (z-d)^{0.9163} f(z) dz \quad (8)$$

$$F_n = 1.013 \eta A_n R^2 \left(\frac{1}{R} \right)^{0.4114} \int_d^{\infty} (z-d)^{0.4114} f(z) dz \quad (9)$$

至此,便建立起了描述微凸体呈 Gauss 分布的数十纳米级粗糙表面干摩擦过程的模型。

3.3 滑动摩擦因数的求解与验证

为了得到更直观且常用的表面接触刚度与滑动摩擦因数,下面考虑使用标准的指数分布代替文中第 3.2 节中的 Gauss 分布来描述微凸体高度的统计规律,以简化摩擦力与法向力的表达式。Greenwood 和 Williamson^[20] 曾指出这种替代分布能很好地描述中等载荷下的情况。这里,令 $h = d/(\sigma_1 + \sigma_2)$, $s = z/(\sigma_1 + \sigma_2)$, 则

$$F_t = 7.062 \eta A_n R^2 \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_2}{R} \right)^{0.9163} \cdot \int_h^{\infty} (s-h)^{0.9163} e^{-s} ds \quad (10)$$

$$F_n = 1.013 \eta A_n R^2 \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_2}{R} \right)^{0.4114} \cdot \int_h^{\infty} (s-h)^{0.4114} e^{-s} ds \quad (11)$$

由于式(10)和式(11)中的积分项存在以下关系:

$$\int_h^{\infty} (s-h)^n e^{-s} ds = n! e^{-h} \quad (12)$$

将式(12)代入式(10)和式(11)中,简化后得到结合面的摩擦力和法向力表达式

$$F_t = 7.062 \eta A_n R^2 \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_2}{R} \right)^{0.9163} (0.9163)! e^{-h} \quad (13)$$

$$F_n = 1.013 \eta A_n R^2 \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_2}{R} \right)^{0.4114} (0.4114)! e^{-h} \quad (14)$$

从而,可以立即得到结合面的表面法向接触刚度 K_n 和滑动摩擦因数 μ

$$K_n = \frac{F_n}{\sigma_1 + \sigma_2} \quad (15)$$

$$\mu = 6.39 \left(\frac{\sigma_1 + \sigma_2}{R} \right)^{0.5049} \quad (16)$$

式(15)和式(16)便是微凸体半径和微凸体分布的标准差分别为 R 、 σ_1 和 R 、 σ_2 的两面心立方纯铜表面在真空中发生干摩擦时的表面法向接触刚度与滑动摩擦因数的表达式。可以看出,结合面的表面法向接触刚度与法向载荷成正比,比例系数为 $(\sigma_1 + \sigma_2)^{-1}$ 。滑动摩擦因数是一个只与结合面表面粗糙度参数有关的函数,与结合面间的载荷大小无关,这与经典 Coulomb 摩擦理论中摩擦因数与法向力的大小无关的描述相一致。

为了检验结果的准确性,下面将模拟计算结果与实验数据^[22-23]进行了对比。如图 16 所示,横坐标 $(\sigma_1 + \sigma_2)/R$ 的区间涵盖了绝大多数工程表面的表面粗糙度参数取值范围。从图 16 可以看出,抛光后铜表面的滑动摩擦因数与较粗糙铜表面的滑动摩擦因数能够较好地分布在模拟曲线的光滑端与粗糙端,在一定程度上验证了模拟结果的准确性。

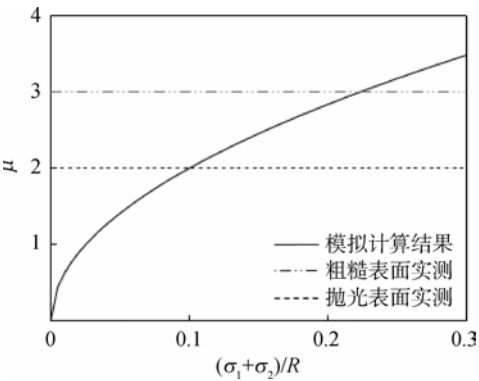


图 16 滑动摩擦因数模拟值与实验值对比
Fig. 16 Comparison of sliding friction coefficient curve between simulation result and experimental result

图 16 中曲线为 μ 的模拟计算结果曲线,短划线代表抛光电铜表面的滑动摩擦因数^[22],双点划线代表铝土擦拭后纯铜表面的滑动摩擦因数^[23](均为真空环境数值)。

4 结 论

1) 在单晶铜微凸体的剪切运动过程中,理想几何外形的微凸体尚未接触时,微凸体表面的金属原子会因为范德华力使其“提前”接触。在整个剪切运动过程中,切向力总体呈现先增大后减小的趋势,而法向力的变化趋势相对复杂;界面上黏着力方向的旋转导致剪切过程前期微凸体间呈现拉力,剪切过程后期微凸体间呈现压力。

2) 微凸体剪切过程的平均切向力与平均法向力都随着微凸体半径的增大而增大。而比例干涉深度增大时,平均切向力明显增大,而平均法向力的变化不明显。

3) 微凸体在剪切过程中的变形能总体呈现先增大后减小的趋势。微凸体内部的剩余变形能随微凸体半径和干涉深度的增大而增大。剩余变形能占总摩擦功的比值与比例干涉深度的关系不明显,而当微凸体半径超过某一阈值后,该比值显著增大。这印证了表面粗糙度与抗疲劳磨损能力

的关系。

4) 当分析尺度从纳米上升到微米时,考虑表面力引起的“提前”接触现象,重新定义了微凸体间的干涉深度、切向力与法向力的零点。拟合得到平均切向力和平均法向力关于微凸体半径和比例干涉深度的关系式,然后根据假设的微凸体高度统计学分布,得到数十纳米级粗糙表面的干摩擦模型。

5) 单晶铜在真空中发生干摩擦时,结合面的表面法向接触刚度与法向载荷成正比,滑动摩擦因数只与表面粗糙度参数有关。与实验结果对比发现,模型预测的滑动摩擦因数在常见表面粗糙度参数取值范围内,包含了光滑表面与较粗糙表面的摩擦因数范围。

参考文献:

[1] 李琳,刘久周,李超. 航空发动机中的干摩擦阻尼器及其设计技术研究进展[J]. 航空动力学报,2016,31(10):2305-2317.
LI Lin, LIU Jiuzhou, LI Chao. Review of the dry friction dampers in aero-engine and their design technologies[J]. Journal of Aerospace Power, 2016, 31(10): 2305-2317. (in Chinese)

[2] 温诗铸,黄平. 摩擦学原理[M]. 北京:清华大学出版社,2012.

[3] 徐家文. 整体叶轮的特种加工方法[J]. 航空精密制造技术,1992(4):19-21.
XU Jiawen. Special working processes of a whole propeller [J]. Aviation Precision Manufacturing Technology, 1992 (4):19-21. (in Chinese)

[4] CHO M H, KIM S J, JANG H. Atomic scale stick-slip caused by dislocation nucleation and propagation during scratching of a Cu substrate with a nanoindenter: a molecular dynamics simulation[J]. Wear, 2005, 259 (7): 1392-1399.

[5] 黄健萌,陈晶晶,李凝. 两种不同形状压头与单晶铜基体间接触力和摩擦力的纳观分析[J]. 摩擦学学报,2015,35 (3):308-314.
HUANG Jianmeng, CHEN Jingjing, LI Ning. Analysis of the contact and friction force behaviour between different indenter shape and substrate on atomic scale[J]. Tribology, 2015, 35(3): 308-314. (in Chinese)

[6] 栾智存. 基于分子动力学模拟的粗糙表面接触与摩擦特性研究[D]. 北京:北京理工大学,2015.
LUAN Zhicun. Research on the contact and friction characteristics of rough surfaces based on molecular dynamics simulations[D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2015. (in Chinese)

[7] ZHONG J, ADAMS J B, HECTOR L G. Molecular dynamics simulations of asperity shear in aluminum[J]. Jour-

nal of Applied Physics,2003,94(7):4306-4314.

[8] ABRAHAM F F, RUDGE W E, ALEXOPOULOS P S. Fragmentation dynamics in asperity collisions: A molecular dynamics simulation study [J]. Computational Materials Science,1994,3(1):21-40.

[9] BHUSHAN B. Principles and applications of tribology [M]. New York:John Wiley and Sons,2013.

[10] 波波夫. 接触力学与摩擦学的原理及其应用[M]. 李强, 雒建斌, 译. 北京:清华大学出版社,2011.

[11] DAW M S, BASKES M I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals[J]. Physical Review: B Condensed Matter, 1984,29(12):6443-6453.

[12] HOOVER W G. Canonical dynamics equilibrium phase space distributions[J]. Physical Review: A, 1985,31(3):1695-1697.

[13] ALLEN M P, TILDESLEY D J. Computer simulation of liquids[M]. Oxford:Oxford University Press,1987.

[14] HAILE J M. Molecular dynamics simulation: elementary methods[M]. New York:John Wiley and Sons,1992.

[15] VILLARREAL M A, OVIEDO O A, LEIVA E P M. A straight forward approach for the determination of the maximum time step for the simulation of nanometric metallic systems[J]. Journal of Chemical Theory and Computation,2012,8(5):1744-1749.

[16] 张甜甜, 黄传兵, 兰昊, 等. 镍基耐高温自润滑刷式封严涂层研究[J]. 航空制造技术, 2017, 60(8): 24-29.
ZHANG Tiantian, HUANG Chuanbing, LAN Hao, et al. Investigation of Ni-based brush seal coatings with self-lubricating property at elevated temperature[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2017, 60(8): 24-29. (in Chinese)

[17] 刘如铁, 李溪滨, 苏春明, 等. 镍基高温自润滑材料的摩擦学特性研究[J]. 粉末冶金材料科学与工程, 1998, 3(3): 206-210.
LIU Rutie, LI Xibing, SU Chunming, et al. Study on the tribological characteristics of high-temperature self-lubricating nickel-base material[J]. Materials Science and Engineering of Powder Metallurgy, 1998, 3(3): 206-210. (in Chinese)

[18] FOILES S M, BASKES M I, DAW M S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu[J]. Physical Review: B Condensed Matter, 1986, 33(12): 7983-7991.

[19] JENG Y R, KAO W C, TSAI P C. Investigation into the mechanical contact behavior of single asperities using static atomistic simulations[J]. Applied Physics Letters, 2007, 91(9): 091904. 1-091904. 3.

[20] GREENWOOD J A, WILLIAMSON J B P. Contact of nominally flat surfaces[J]. Proceedings of the Royal Society of London: Series A Mathematical and Physical Sciences, 1966, 295(1442): 300-319.

[21] GREEN A P. Friction between unlubricated metals: A theoretical analysis of the junction model[J]. Proceedings of the Royal Society of London: Series A Mathematical and Physical Sciences, 1955, 228(1173): 191-204.

[22] BROWN R D, BURTON R A. Friction and adhesion of copper in vacuum[J]. Thorax, 1967, 89(4): 332-336.

[23] JANE J, ROAMER P, STAUGAITIS C L. Sliding friction of copper alloys in vacuum[J]. Tribology Transactions, 1969, 12(2): 171-182.

(编辑:王碧琚)