Федеральное агентство научных организаций
Уральское отделение Российской академии наук
Институт машиноведения УрО РАН
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН

X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «МЕХАНИКА, РЕСУРС И ДИАГНОСТИКА МАТЕРИАЛОВ И КОНСТРУКЦИЙ»

Сборник материалов

(Екатеринбург, 16–20 мая 2016 г.)

Екатеринбург
ИМАШ УрО РАН
2016

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ОТНОСИТЕЛЬНОГО ПРОСКАЛЬЗЫВАНИЯ SiO_2 И УГЛЕРОДА В АМОРФНО-ПОДОБНОМ СОСТОЯНИИ

Дмитриев А.И., Никонов А.Ю.

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, д. 2/4, пр. Академический, г. Томск, 634055, Российская Федерация

Томский государственный университет, д. 36, пр. Ленина, г. Томск, 634050, Российская Федерация

e-mail: dmitr@ispms.ru

В работе с использованием метода молекулярной динамики проведено изучение особенностей механизмов относительного проскальзывания, протекающих в области контакта двух кристаллических тел, содержащих аморфную прослойку. В качестве объектов исследования были выбраны образцы, состоящие из атомов Si и O, образующих решетку кремнезема, и образцы, содержание прослойку из атомов углерода. Выбор материалов обусловлен имеющимися литературными данными, указывающими на то, что кремнезем и углерод в аморфно подобном состоянии характеризуются низкими фрикционными свойствами.

В работе изучались особенности поведения выбранных материалов в условиях сдвигового нагружения. С этой целью моделировались следующие конфигурации: два кристаллита ОЦК железа с аморфным промежуточным слоем углерода, два алмазных кристалла с аморфным слоем углерода и два кристалла кремнезема с промежуточным слоем того же материала в аморфно-подобном состоянии. Межатомное взаимодействие в случае железа и алмаза с углеродом описывалось в рамках модифицированного метода погруженного атома [1]. Для изучения поведения образца из кремнезёма использовался трёхчастичный потенциал межатомного взаимодействия, предложенный Терсоффом [2]. Моделировалось сдвиговое нагружение с постоянной скоростью. Одновременно с этим прикладывалась дополнительная сжимающая сила, величина которой варьировалась в различных задачах.

Результаты моделирования позволили выявить несколько механизмов относительного проскальзывания, реализующихся в объеме аморфной прослойки, которые способствуют проявлению низких фрикционных свойств исследуемых материалов. Один из обнаруженных механизмов заключается в формировании согласованного коллективного движения атомов ротационного характера. Обнаружено влияние температурного фактора на особенности механизмов относительного проскальзывания моделируемых материалов. Таким образом, показано, что оба исследуемых материала в аморфно-подобном состоянии могут проявлять низкие фрикционные свойства, а, следовательно, выступать в качестве частиц твёрдой смазки.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ №14-19-00718.

Литература

1. L.S.I. Liyanage, et al., Phys. Rev. B 89, 094102 (2014).
2. S. Mumetoh et al, Comp. Mat. Sci. 39, 334-339 (2007).