

## КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТРЕНИЯ В НАНОКОНТАКТАХ

Заводинский В.Г., Каминский О.И.

*ФГБУН Институт материаловедения Хабаровского научного центра  
Дальневосточного отделений Российской академии наук, г. Хабаровск, Россия*

### АННОТАЦИЯ

С помощью квантово-механического подхода (теория функционала плотности и метод псевдопотенциала) исследован на атомарном уровне процесс трения покоя в нанопарах «алюминий – алюминий», «вольфрам – вольфрам» и «алюминий – вольфрам» в присутствии внешнего давления. В качестве нанопар взяты системы, состоящие из кристаллической нанопластины и кристаллического наностержня прямоугольного сечения. Нанопластины обладали бесконечной периодической структурой в направлениях X и Y; наностержни – в направлении Y. Процесс трения изучался путем приведения стержня и пластины в равновесный контакт с последующим пошаговым смещением стержня относительно пластины вдоль направления X. При этом стержень находился поверх пластины (в направлении Z). На каждом шаге находилась полная энергия системы и вычислялась действующая на стержень сила. Сила трения находилась путем вычисления отношения изменения полной энергии к величине шага смещения стержня. Сила давления прикладывалась к стержню по оси Z. Коэффициент трения находился как отношение силы трения к величине силы давления.

Наблюдение за поведением атомов показало, что для всех исследованных нанопар процесс трения сопровождается процессами деформации и разрушения. При этом деформации подвержены оба компонента нанопары, а разрушение наблюдается только в наностержне. Максимальным деформациям и разрушениям подвержены алюминиевые стержни: как в парах «алюминий – алюминий», так и в парах «алюминий – вольфрам». Вольфрамовые стержни не разрушаются, а деформации в них и в вольфрамовых пластинах минимальны.

Коэффициенты трения в парах «алюминий – алюминий» с увеличением давления уменьшаются, а в парах «алюминий – вольфрам» и «вольфрам – вольфрам» увеличиваются.

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

## QUANTUM-MECHANICAL STUDY OF THE FRICTION IN NANOCNTACTS

Zavodinsky V.G., Kaminsky O.I.

*The Institute of Materials Science, Khabarovsk Scientific Center, Russian Academy  
of Sciences, Khabarovsk, Russia*

### ABSTRACT

The quantum-mechanical approach (the density functional theory and the pseudopotential method) is used to study the friction in the nanopairs “aluminium – aluminium”, “aluminium – tungsten” and “tungsten – tungsten” on the atomic level; an external pressure was taken into

account. Nanopairs were constructed from crystalline nanoslabs and crystalline nanorods with rectangular cross sections. Nanoslabs had infinite periodic structures along X and Y directions; nanorods were periodic in the Y directions. Process of friction was studied by reduction of a rod and a slab in equilibrium contact with the subsequent step-by-step shift of a rod concerning a slab along the X direction. During the process the rod was over a plate (in the direction of Z). The total energy of system was calculated on each step. The friction force was calculated as a relation of change of the total energy to the value of the rod shift step. Pressure force was applied to a rod on axis Z. The coefficient of friction was as the friction force relation to the pressure force.

Observation over behavior of atoms showed that for all studied nanopairs process of friction is followed by processes of deformation and destruction. Thus deformations are subject both components of a nanopair, but destructions are observed only in a nanorod. Aluminium rods are subject to the maximum deformations and destructions: both in pairs "aluminium-aluminium", and in pairs "aluminium-tungsten". Tungsten rods do not destruct, and deformations in them and in tungsten plates are minimal. Friction coefficients for pairs "aluminium-aluminium" decrease with increasing of pressure, and they increase for "aluminium-tungsten" and "tungsten-tungsten" pairs.

**Keywords:** first-principles modeling; nanotribology; static friction; aluminium; tungsten

## ВВЕДЕНИЕ

Исследование процессов трения в наносистемах в последние годы становится все более актуальной задачей, как для экспериментаторов, так и для теоретиков [1-3]. Это обусловлено тремя основными причинами. Во-первых, в них заинтересованы инженеры, которые развивают нанотехнологии, основанные на механических взаимодействиях между наночастицами и другими наноразмерными объектами.

Во-вторых, все больших успехов добиваются наномеханика и электронаномеханика. И, в-третьих, понимание физики и химии процессов трения на атомном уровне, ставшее возможным благодаря появлению мощных и тонких методов исследования, позволяет пролить свет на многие вопросы, накопившиеся за века и даже тысячелетия практической деятельности человечества.

Экспериментальные исследования в области нанотрибологии опираются, в основном, на технику сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и атомной силовой микроскопии (АСМ), которые позволяют изучать механическое и химическое взаимодействие сверхтонкой иглы с поверхностью образца. Теоретические работы представляют собой компьютерное моделирование взаимодействия различных нанообъектов в различных условиях. При этом, чтобы сделать результаты моделирования более сравнимыми с экспериментом и практикой, исследователи применяют эмпирические и полуэмпирические методы моделирования, работающие с большим числом атомов (до десятков тысяч). Однако такие методы используют не всегда корректные подходы к описанию межатомных взаимодействий, что зачастую приводит к искажению наиболее существенных деталей механизмов трения. Подлинно корректное описание межатомных взаимодействий возможно только на квантово-механическом уровне, например, в рамках теории функционала плотности. Например, в работе [4] этот подход использовался для моделирования реакции наночастиц на различного рода деформации, в том числе для исследования процесса резания; в настоящей же работе с его

помощью мы исследуем процесс трения. В качестве объектов исследования мы выбрали три нанопары: «алюминий-алюминий», «вольфрам-алюминий» и «вольфрам-вольфрам». Выбор обусловлен желанием изучить трение в наноконтактах, различных по твердости.

Известно, что существует довольно много видов трения: сухое и со смазкой, трение в вакууме и трение в газовой среде, трение динамическое и трение покоя, трение скольжения и трение качения... В данной работе мы останавливаем свое внимание на изучении трения покоя в вакууме, поскольку этот случай наиболее подходит для квантово-механического моделирования и в то же время позволяет рассмотреть процессы, близкие к реальным экспериментам, проводимым с помощью СТМ.

## 1. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Все расчеты, описанные в данной статье, произведены с помощью программного пакета FN96md [5], основанном на теории функционала электронной плотности [6], методе псевдопотенциала [7] и базисе плоских волн. В данной работе использовались псевдопотенциалы алюминия и вольфрама, построенные с помощью пакета FN96PP [8] по схеме Труллера-Мартинса [9]. Обменно-корреляционное взаимодействие учитывалось в приближении локальной плотности [10,11], энергия обрезания набора плоских волн была взята равной 50 ридберг. Для изучения процесса трения использовались суперячейки, в которых размещались исследуемые объекты – нанопластина и наностержень; схемы их взаимного расположения приведены на рис.1. Пластина в подобных задачах используется для моделирования как поверхности твердого тела. Использование наностержня, удаленного от его виртуальных изображений в направлениях X и Z, позволяет устранить ложные взаимодействия, возникающие в методике периодических граничных условий. Фактически мы моделируем наноконтакт макротела, рассматривая его на атомарном уровне. Размеры суперячеек:  $45.869 \times 7.653 \times 60$  а.е.<sup>3</sup> для Al-Al,  $59.7 \times 5.97 \times 40$  а.е.<sup>3</sup> для W-W и  $59.7 \times 5.97 \times 40$  а.е. (1 а.е. = 0.529 Å.) для Al-W. Количество атомов, содержащихся в рассматриваемых системах: 51 для Al-Al, 44 для W-W, 30 атомов Al и 18 W для Al-W.

Как видно из рис.1, мы исследовали трение в плоских, атомарно гладких контактах. Это так называемое адгезионное трение [12]. Принято считать, что в нем практически отсутствуют химические взаимодействия и процессы разрушения.

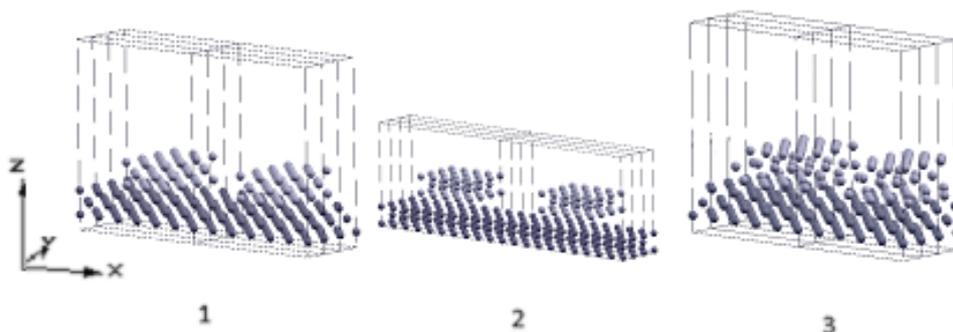


Рис.1. Стартовые конфигурации исследованных наносистем: 1) Al-Al, 2) W-W, 3) Al-W.

Первая стадия моделирования процесса трения заключалась в нахождении равновесного состояния системы в отсутствии внешнего давления  $P$ , т.е. определялось расстояние между исследуемыми объектами, при котором ее полная энергия  $E(P=0)$  минимальна. Далее производился пошаговый сдвиг наностержня относительно нанопластины. Величина шага  $\Delta x$  составляла 1 а.е. На каждом шаге производился квантово-механический расчет, включающий в себя нахождение равновесных позиций атомов и полной энергии системы  $E$ . Из изменения энергии находилась сила, равная силе трения:  $F = \Delta E / \Delta x$ . После этого стержень прижимался к пластине, то есть, верхний слой смещался по оси  $Z$  на величину  $\Delta z$ , и находилась новая равновесная энергия  $E(P \neq 0)$ . Величина давления вычислялась по формуле:  $P = \Delta E / \Delta z$ . В этом сжатом состоянии повторялся процесс пошагового сдвига наностержня, нахождение новой равновесной энергии  $E(P)$  и силы трения. Затем система снова сжималась на величину  $\Delta z$ , и процесс повторялся. Коэффициент трения вычислялся по формуле  $k = F/P$ .

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

### 2.1. Система Al-Al.

На рис.2 показано изменение атомной структуры системы Al-Al в процессе движения алюминиевого наностержня по алюминиевой нанопластине в отсутствие давления ( $P=0$ ).

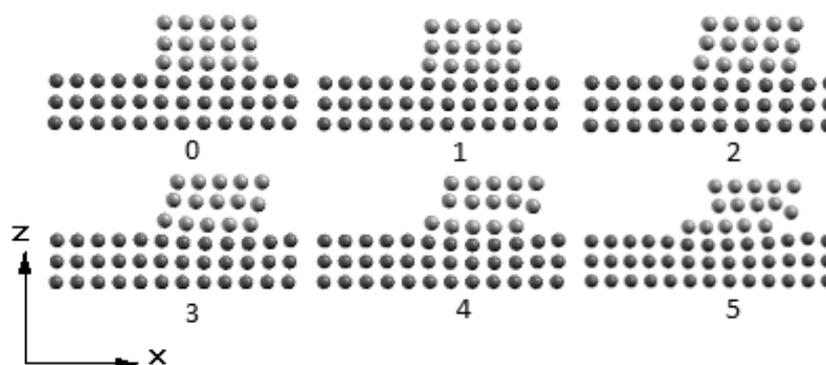


Рис.2. Изменение атомной структуры системы Al-Al в процессе компьютерного моделирования процесса трения. Цифрами указаны величины смещения верхнего слоя стержня по оси X в атомных единицах.

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.3-5 приведены результаты моделирования системы Al-Al при наличии давления. Из этих рисунков видно, что давление в системе Al-Al (в изученных пределах) не вносит качественных изменений в механизм трения: наностержень разрушается, нанопластина деформируется, но не разрушается.

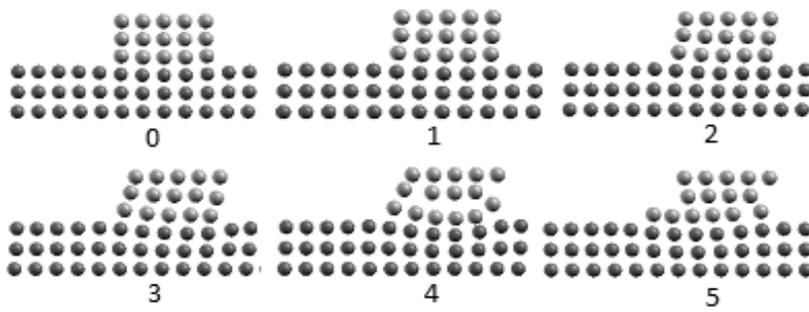


Рис.3. Изменение атомной структуры Al-Al при  $P = 0,5$  ГПа .

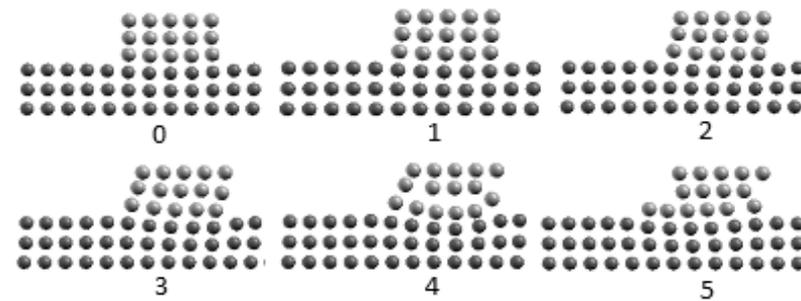


Рис.4. Изменение атомной структуры Al-Al при  $P = 2,3$  ГПа .

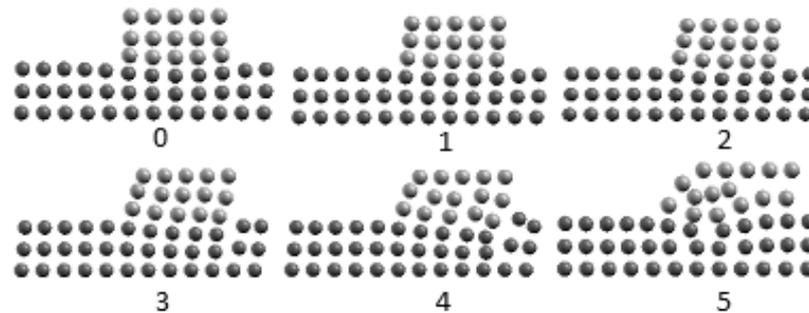


Рис.5. Изменение атомной структуры Al-Al при  $P = 12,0$  ГПа .

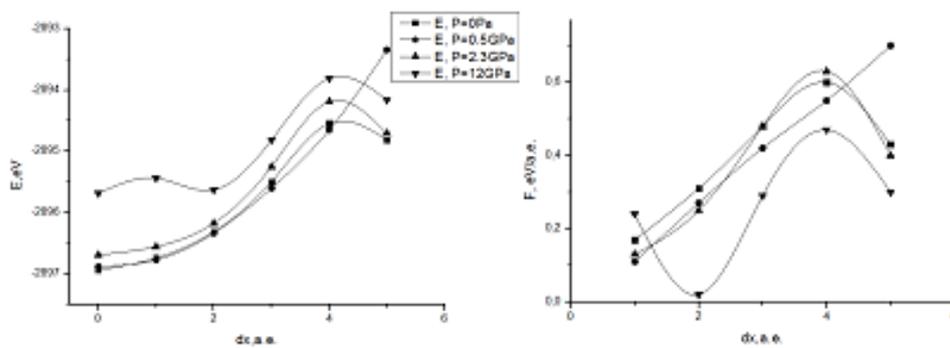


Рис.6. Изменение полной энергии при сдвиге вдоль оси X и сил трения для различного давления в системе Al-Al.

Рис.6 демонстрирует изменение полной энергии системы  $E$  и сил трения  $F$  как функции сдвига верхнего слоя наностержня вдоль направления X

при различных давлениях. При  $\Delta x = 5$  а.е. энергия и силы начинают уменьшаться, что характеризует переход трения покоя к трению скольжения.

На рис.7 изображено поведение вычисленного коэффициента трения покоя как функции давления для системы Al-Al. Как видно из графика, коэффициент трения покоя уменьшается с увеличением давления.

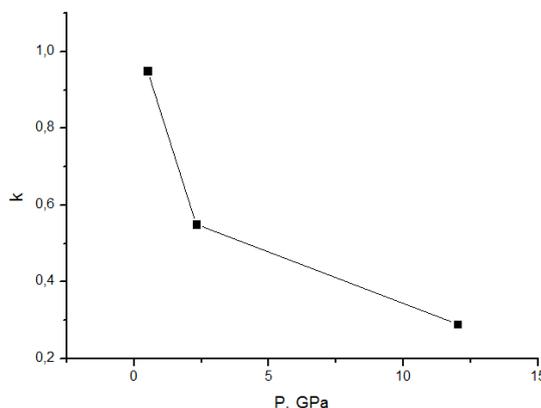


Рис.7. Зависимость коэффициента трения в системе Al-Al от давления.

### 2.2. Система W-W.

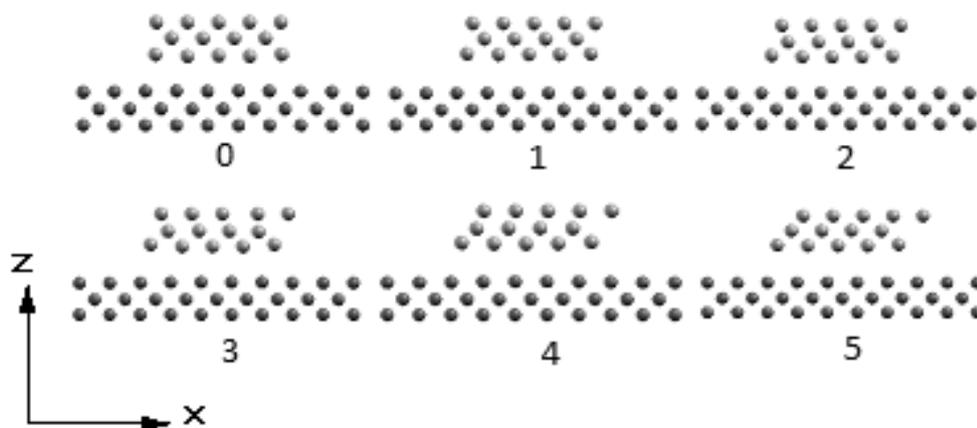


Рис.8. Изменение атомной структуры W-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 0$ .

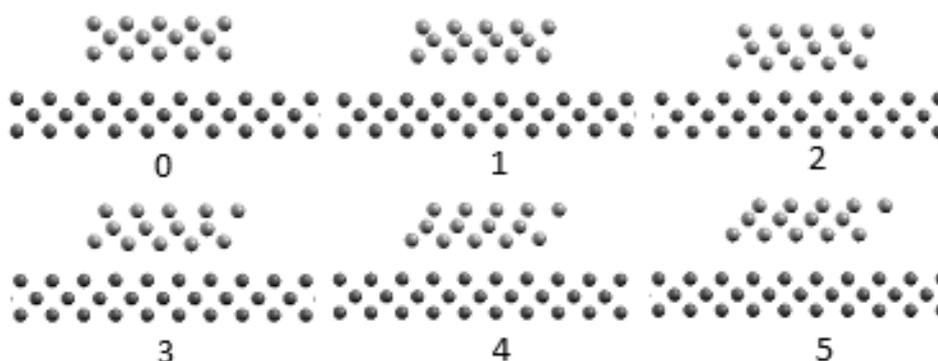


Рис.9. Изменение атомной структуры W-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 350,0$  ГПа.

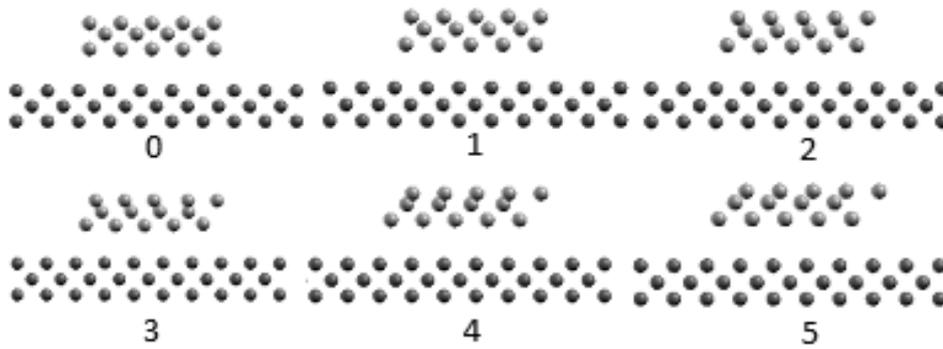


Рис.10. Изменение атомной структуры W-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 433,0$  ГПа .

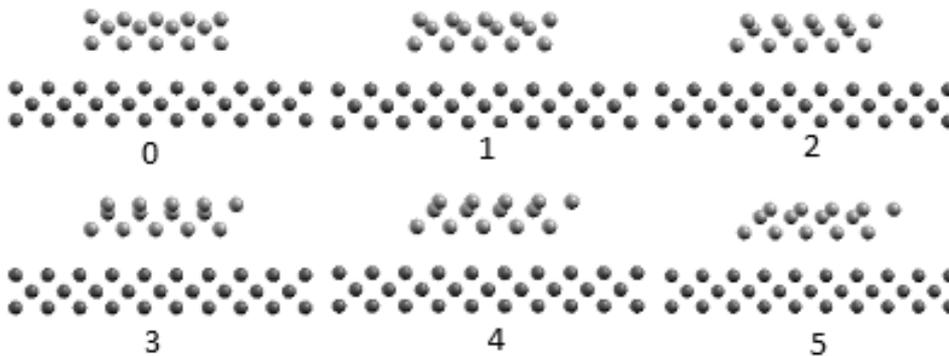


Рис.11. Изменение атомной структуры W-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 610,0$  ГПа .

На рис.8-11 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. Из этих рисунков видно, что при увеличении давления в системе W-W увеличивается деформация стержня, пластина практически не деформируется.

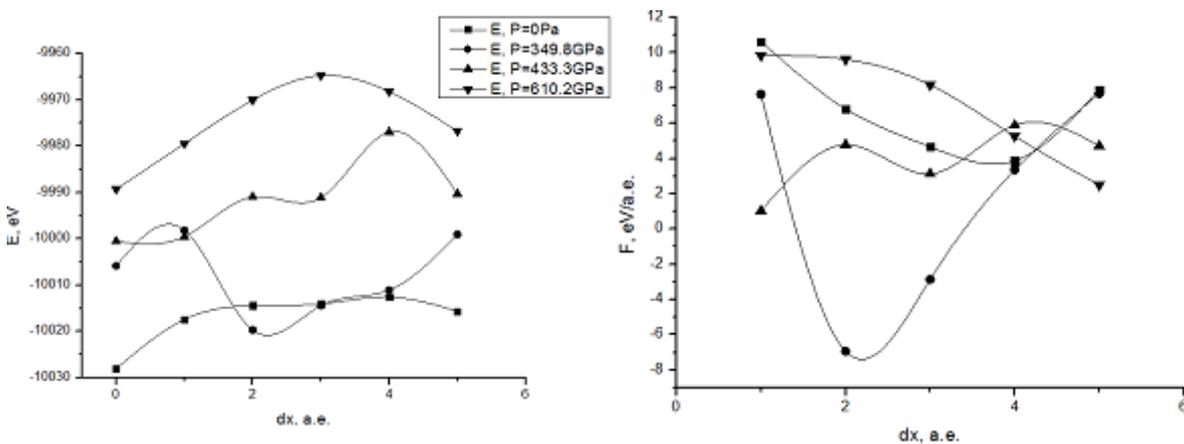


Рис.12. Изменение полной энергии при сдвиге вдоль оси X и сил трения для различного давления в системе W-W.

Рис.12 демонстрирует изменение полной энергии системы  $E$  и сил трения  $F$  при движении наностержня вдоль оси  $X$  при различных давлениях  $P$ . Легко видеть, что минимум полной энергии при  $P = 350$  ГПа сдвигается в положение, которое соответствует  $\Delta x = 2$  а.е. Также видно, что величина силы нестабильна и может принимать даже отрицательные значения.

На рис.13 изображено изменение вычисленного коэффициента трения покоя от давления для системы W-W. Как видно из графика, с увеличением давления коэффициент трения увеличивается.

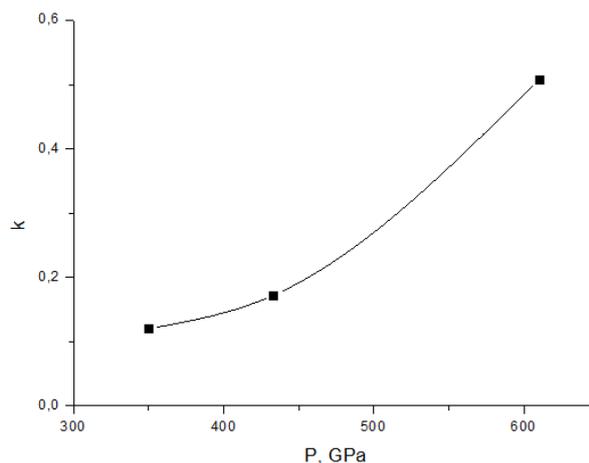


Рис.13. Зависимость коэффициентов трения в системе W-W от давления.

### 2.3. Система Al-W.

На рис.14-17 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. Из этих рисунков видно, что при увеличении давления в системе Al-W увеличивается деформация стержня, с последующим его разрушением, нанопластина слегка деформируется, но не разрушается.

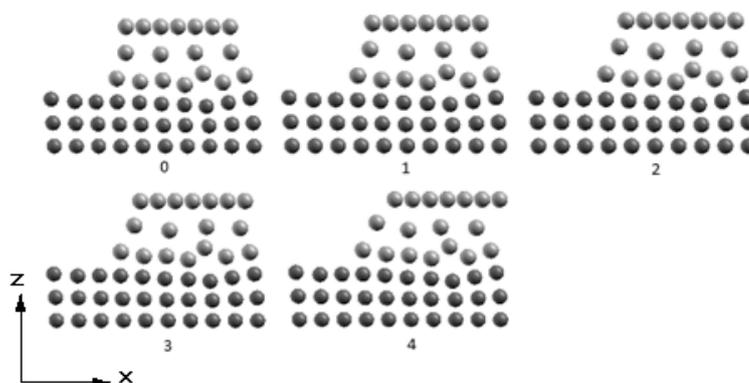


Рис.14. Изменение атомной структуры Al-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 0$ .

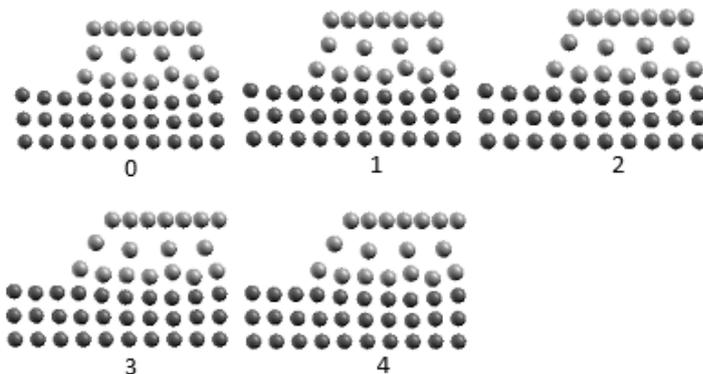


Рис.15. Изменение атомной структуры Al-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 0,3$  ГПа.

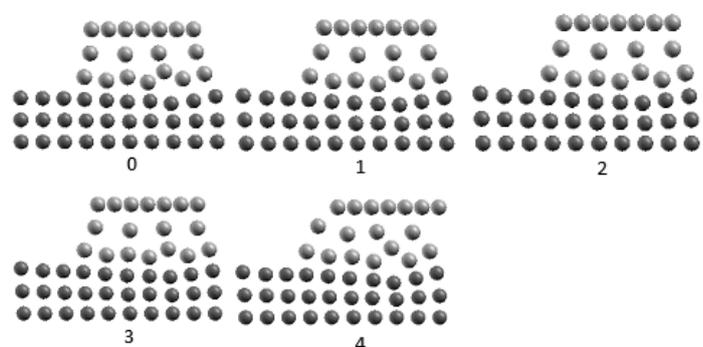


Рис.16. Изменение атомной структуры Al-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 14,8$  ГПа.

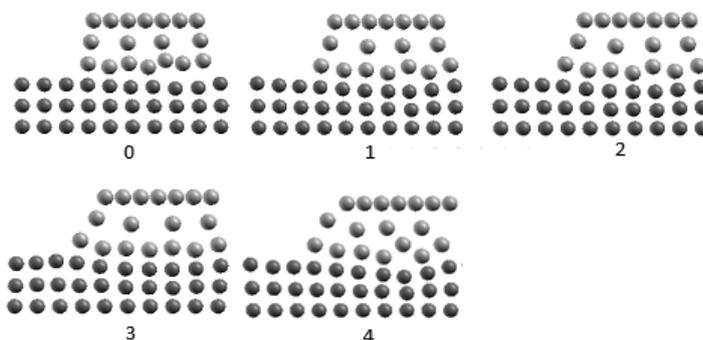


Рис.17. Изменение атомной структуры Al-W в процессе компьютерного моделирования при  $P = 18$  ГПа.

Рис.18 демонстрирует изменение полной энергии системы  $E$  и сил трения  $F$  при движении наностержня вдоль оси  $X$  при различных давлениях  $P$ . Из графика можно увидеть, что при  $P = 14,8$  ГПа и  $P = 18$  ГПа происходит смещение абсолютного минимума энергии системы для данного давления, это говорит о том, что оптимальная конфигурация атомов находится в положении  $\Delta x = 1$  а.е.

На рис.19 изображено изменение вычисленного коэффициента трения покоя от сжатия стержня для системы Al-W. Как видно из графика с увеличением давления коэффициент трения покоя увеличивается, что связано с отрывом двух верхних слоев стержня с последующим переходом трения покоя в трение скольжения, аналогично случаю W-W.

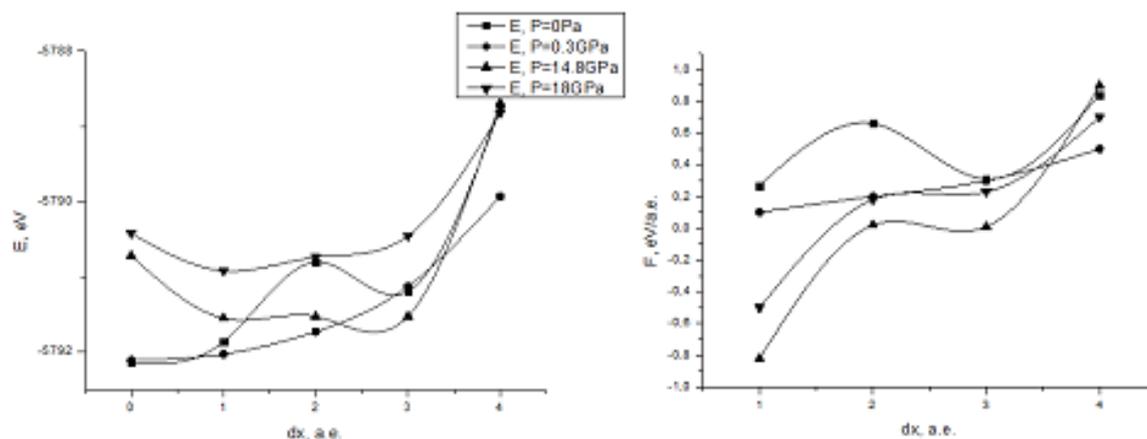


Рис.18. Изменение полной энергии при сдвиге вдоль оси X и сил трения для различного давления в системе Al-W.

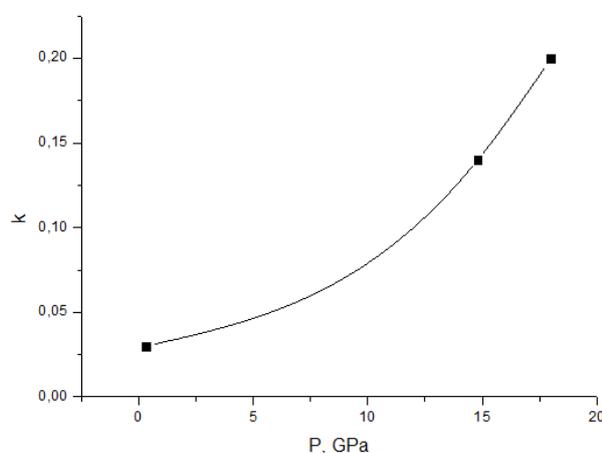


Рис.19. Зависимость коэффициентов трения в системе Al-W от давления.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Квантово-механическое моделирование позволяет исследовать процесс трения на атомарном уровне.

Проведенные расчеты позволяют нам сделать следующие выводы:

1. В процессе трения происходит существенное разрушение стержня, пластина только деформируется, в случае W-W деформация пластины минимальна.
2. Сила трения на атомарном уровне – нестабильная величина, в некоторых случаях она может принимать отрицательные значения, что отражает момент формирования новых связей между атомами.
3. С увеличением давления коэффициент трения в системе Al-AL уменьшается. В системах Al-W, W-W коэффициент трения увеличивается.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Braun O.M., Naumovets A.G. *Nanotribology: Microscopic mechanisms of friction* // Surface Science Reports. – 2006. – Vol.60. – Pp.79-158.
2. Ken-ichi Saitoh, Youhei Sameshima, Syuhei Daira *Nano-Scale Modelling and Simulation of Metal Wire Drawing by Using Molecular Dynamics Method* // World J. of Nano Science and Engineering. – 2014. – Vol.4. – Pp.70-83.

3. Zhiyong Ling, Lonbg Qian, Guanggui Cheng, Zhongqiang Zhang, Dongjian Sun. *Copper and Aluminium Nano-films* // Intern. J. of Computer Simulation in Engineering and Technology. – 2013. – Vol.3. – Iss.3 – Pp.80-83.
4. Заводинский В.Г. *Моделирование процесса резания на атомном уровне* // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2013. – Т.19. – №3. – С.420-431.
5. 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. – Vol.107. – Pp.187-205.
6. Kohn W., Sham J.L. *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects* // Phys. Rev. – 1965. – Vol.140. – Pp.1133-1138.
7. Cohen M.L., Heine V. *Pseudopotential theory of cohesion and structure* / In: Solid State Physics. New-York: Academic Press. – 1970. – Vol.24. – Pp.38-249.
8. Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory* // Comp. Phys. Commun. – 1999. – Vol.119. – Pp.67-165.
9. Troullier N., Martins J.L. *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations* // Phys. Rev. B. – 1991. – Vol.43. – Pp.1993-2006.
10. Perdew J.P., Zunger A. *Self-interaction correction to density functional approximation for many-electron systems* // Physical Review B. – 1981. – Vol.23. – Pp.5048-5079.
11. Ceperley D.M., Alder B.J. *Ground state of the electron gas by a stochastic method* // Physical Review Letters. – 1980. – Vol.45. – Pp.566-569.
12. Dedkov G. V. *Nanotribology: experimental facts and theoretical models* // Uspekhi Fizicheskikh Nauk and Russian Academy of Sciences. – 2000. – Vol.43. – №6. – Pp.541-572.

## REFERENCES

1. Braun O.M., Naumovets A.G. *Nanotribology: Microscopic mechanisms of friction*. Surface Science Reports, 2006, Vol.60, Pp.79-158.
2. Ken-ichi Saitoh, Youhei Sameshima, Syuhei Daira *Nano-Scale Modelling and Simulation of Metal Wiredrawing by Using Molecular Dynamics Method*. World J. of Nano Science and Engineering, 2014, Vol.4, Pp.70-83.
3. Zhiyong Ling, Lonbg Qian, Guanggui Cheng, Zhongqiang Zhang, Dongjian Sun. *Copper and Aluminium Nano-films*. International Journal of Computer Simulation in Engineering and Technology, 2013, Vol.3, Iss.3, Pp.80-83.
4. Zavodinsky V.G. *Modelirovanie protsessa rezaniia na atomnom urovne [Atomic level simulation of cutting]*. Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksii, 2013, Vol.19, No.3, Pp.420-431.
5. 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, Vol.107, Pp.187-205.
6. Kohn W., Sham J.L. *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*. Phys. Rev, 1965, Vol.140, Pp.1133-1138.
7. Cohen M.L., Heine V. *Pseudopotential theory of cohesion and structure*. In: Solid State Physics. New-York, Academic Press, 1970, Vol.24, Pp.38-248.

8. Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory*. Comp. Phys. Commun, 1999, Vol.119, Pp.67-165.
9. Troullier N., Martins J.L. *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*. Phys. Rev. B, 1991, Vol.43, Pp.1993-2006.
10. Perdew J.P., Zunger A. *Self-interaction correction to density functional approximation for many-electron systems*. Physical Review B, 1981, Vol.23, Pp.5048-5079.
11. Ceperley D.M., Alder B.J. *Ground state of the electron gas by a stochastic method*. Physical Review Letters, 1980, Vol.45, Pp.566-569.
12. Dedkov G. V. *Nanotribology: experimental facts and theoretical models*. Uspekhi Fizicheskikh Nauk and Russian Academy of Sciences, 2000, Vol.43, No.6, Pp.541-572.

Поступила в редакцию 18 августа 2016 года

---

Сведения об авторах:

Заводинский Виктор Григорьевич – д.ф.-м.н., И.о. директора, ФГБУН Институт материаловедения Хабаровского научного центра ДВО РАН, г. Хабаровск, Россия; e-mail: [vzavod@mail.ru](mailto:vzavod@mail.ru)

Каминский Олег Игоревич – инж., ФГБУН Институт материаловедения Хабаровского научного центра ДВО РАН, г. Хабаровск, Россия; e-mail: [kamin\\_div0@mail.ru](mailto:kamin_div0@mail.ru)