

**Решение квазистатической задачи с помощью модели Томлинсона**

Попова Т.А.

Московский государственный университет приборостроения и информатики  
8-917-560-73-35, [tatiana241187@gmail.com](mailto:tatiana241187@gmail.com)

*Аннотация.* В статье рассматривается процесс взаимодействия цепочек наночастиц. С помощью специализированной программы были получены экспериментальные данные, позволяющие решить квазистатическую задачу с определенными входными параметрами в области нанотрибологии. В ходе выполнения работы было выяснено, что изменение количества атомов в цепочке напрямую влияет на учащение колебаний силы. Кроме того, было показано, что при увеличении периода силы воздействия со стороны движущейся цепочки  $a$ , представленной синусоидальной функцией, увеличивается амплитуда перемещения.

*Ключевые слова:* атом, колебания, сила, жесткость пружины, квазистатическая задача, итерация.

Модель Томлинсона описывает процесс трения двух цепочек наночастиц. При этом сила воздействия со стороны движущейся цепочки представляется синусом с определенным периодом  $a$ . Другие силы не рассматриваются. Деформирующую цепочку представляют как группу независимых атомов, каждый из которых закреплен на пружине с коэффициентом жесткости  $k$

$$k_T \cdot u_i + f_1 \sin \left[ \frac{2\pi(ir_i + u_i + U_c)}{\alpha} \right] = 0. \quad (1)$$

Разрешающее уравнение модели (1) показывает, что перемещение атома  $u_i$  напрямую зависит от коэффициента жесткости пружины, а также от параметров синусоиды, заменяющей воздействие деформирующей цепочки. Так же определяющим является параметр  $f_1$ , получаемый из уравнения (2) и являющийся первым членом разложения в ряд Фурье  $F(x)$ .

$$F(x) = f_0 + \sum_k f_k \sin \left[ \frac{k\pi}{\alpha} (x + U_c) \right], \quad (2)$$

где:  $a$  – период структуры цепочки  $\Pi$ ,  $U$  – параметр нагружения,  $f_k$  – сила кинетического трения.

Коэффициент  $f_1$  может быть представлен через параметр  $\lambda$ , равный  $\lambda = \frac{2\pi f_1}{ka}$  и является амплитудой синусоиды.

Была использована программа на языке Fortran, с помощью которой решается данная задача. Задаются исходные данные, по которым программа решает основные уравнения и находит силу трения и координаты перемещения атомов. Данные обрабатываются с помощью программной среды MathCad 14.

Проведем исследование влияния изменения параметров на силу трения  $F$  и перемещение атома  $U$ .

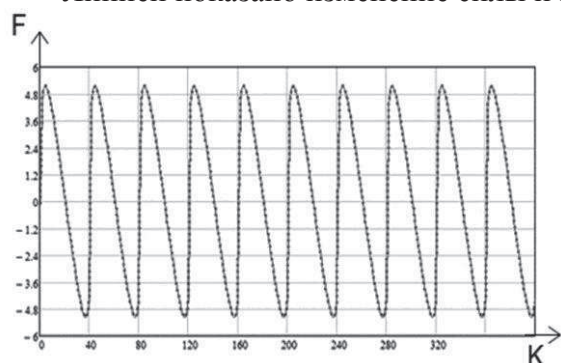
Влияние расстояния между цепочками.

С помощью программы была решена задача со следующими входными параметрами: число атомов деформируемой цепочки равно 20. Число атомов деформирующей цепочки (не влияет в связи с заменой воздействия на бесконечную синусоиду) выбиралось 10. Период синусоиды  $a = 1 r_e$ ,  $\lambda = 1$ . Расстояние между цепочками  $d$  менялось от 1 до 2 атомных расстояний  $r_e$ . Максимальное расстояние = 30, сдвиг деформирующей цепочки произведен на 10 единиц влево. Число итераций задавалось равным 400.

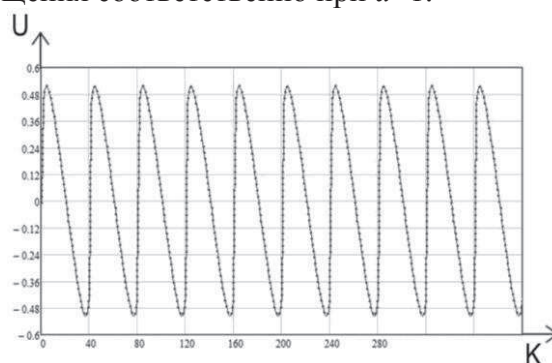
В ходе выполнения работы было выяснено, что изменение расстояния не влияет на си-

лу и перемещение атомов, что показано на рисунке 1 и рисунке 2. Точками показано изменение силы и перемещения соответственно для  $d=2$ .

Линией показано изменение силы и перемещения соответственно при  $d=1$ .



**Рисунок 1. Изменение силы трения**



**Рисунок 2. Изменение координаты перемещения**

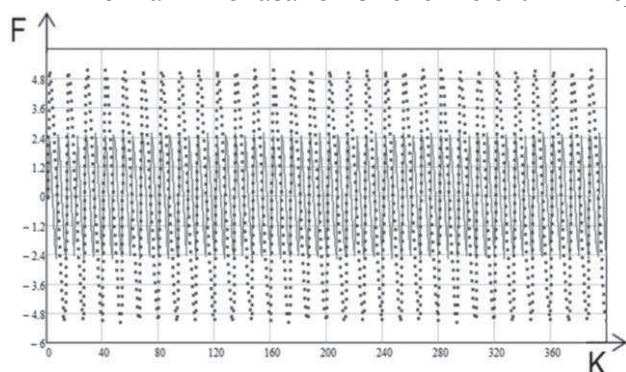
Данные графики построены для 15-го атома. Для остальных атомов значения друг от друга не отличаются.

Далее изучим влияние изменения периода синуса  $a$  остальные входные данные неизменны.

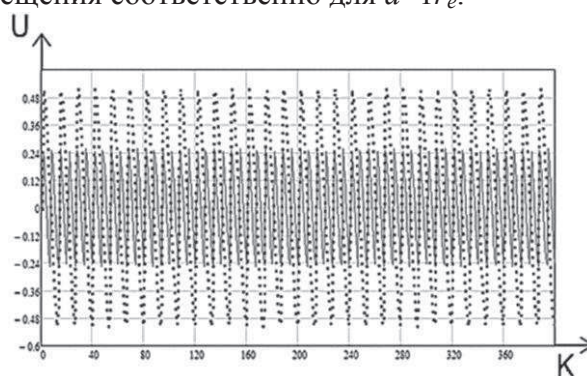
Построим графики для 15 атома.

Линией показано изменение силы и перемещения соответственно при  $a=0,5r_e$

Точками показано изменение силы и перемещения соответственно для  $a=1r_e$ .

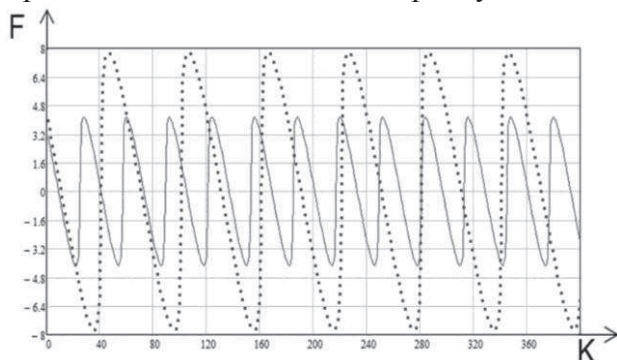


**Рисунок 3. Изменение силы трения**

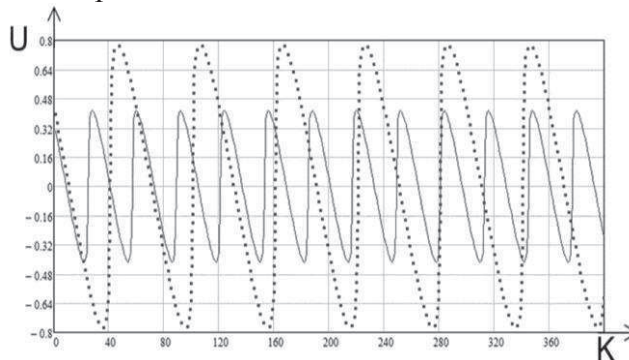


**Рисунок 4. Изменение координаты перемещения**

Приведем графики для следующих входных данных: число атомов деформируемой цепочки равно 20. Число атомов деформирующей (не влияет в связи с заменой воздействия на бесконечную синусоиду) выбиралось 10.  $\lambda = 1$ . Расстояние между цепочками  $d$  равно 2 атомным расстояниям  $r_e$ . Максимальное расстояние =  $10 r_e$ , сдвиг деформирующей цепочки произведен на один атомный радиус влево. Число итераций – 400.



**Рисунок 5. Сила трения для 5-го атома**



**Рисунок 6. Перемещение для 5-го атома**

Линией построен график для периода нижней цепочки равного  $0,5 r_e$ ; точками – для периода равного  $1 r_e$ .

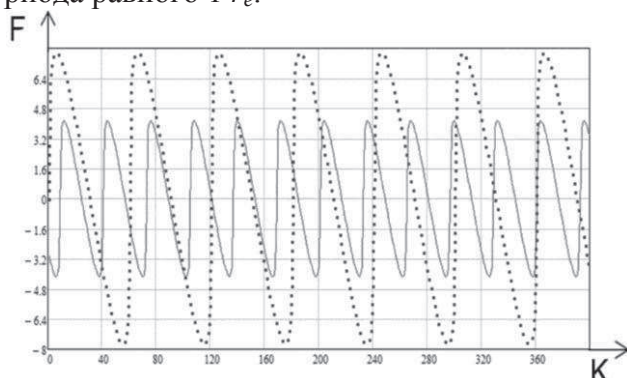


Рисунок 7. Сила трения для 15-го атома

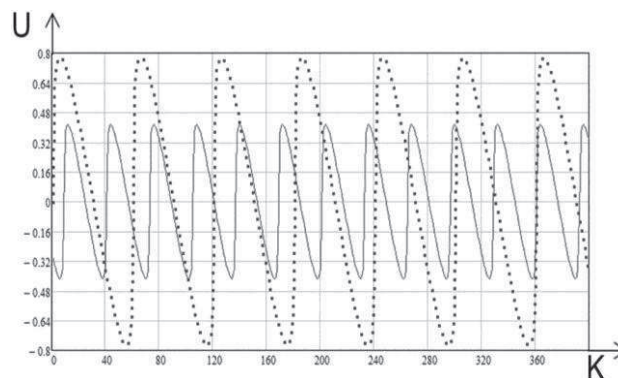


Рисунок 8. Перемещение для 15-го атома

### Выводы

Таким образом, при большем значении длины деформированной цепочки колебания становятся чаще.

При увеличении периода колебания силы, а следовательно, и перемещения (отличаются на порядок) усиливаются. Это связано с тем, что при движении нижней цепочки (представленной синусоидальной функцией) вправо, при попадании максимума функции на исследуемый атом, атом отклоняется влево. При прохождении пика синуса возвращающая сила пружины заставляет атом переместиться вправо, вызывая соответствующие колебания.

### Литература

1. Bharat Bhushan «Nanotribology and Nanomechanics»
2. Дедков Г.В. О диссипации механической энергии в бесконечном динамическом режиме сканирующего зондового микроскопа в вакууме. Физика твердого тела, 2006, том 48, вып.4
3. Статьи / Российские нанотехнологии/ Том 1 / №1-2 2006/ WWW.NANORF.RU
4. Нанометр/ Публикации: Научно-популярные статьи / Нанотрибология: трение под микроскопом  
[http://www.nanometer.ru/2008/02/22/nanotribologia\\_atomno\\_silovaa\\_mikroskopia\\_6102.html](http://www.nanometer.ru/2008/02/22/nanotribologia_atomno_silovaa_mikroskopia_6102.html)
5. Браун О.М. Нанотрибология: механизмы трения на атомном уровне. Институт физики НАН Украины.
6. Кравчук А.С., Карлышков С.В. Численное моделирование деформации и разрушения на наноуровне / Вестник СамГУ / Естественнаучная серия 2007 № 4(54).