

СПЛЮЩИВАНИЕ СИЛОВОГО ПОЛЯ ВАКАНСИИ НА КИНЕМАТИЧЕСКОЙ ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

В. В. Мещеряков, Г. Д. Кузнецов, А. А. Юлдашев*

*Московский государственный институт стали и сплавов
117936, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 17 ноября 1998 г.

Показано, что в процессе диффузионного формирования границы кристалла, движущегося равномерно по поверхности другого, должно происходить сплющивание полей смещений кристаллической решетки в окрестности вакансий. С ростом скорости относительного смещения кристаллов сплющивание вакансий приводит к уменьшению их дипольных моментов и к увеличению числа контактных атомов на границе раздела кристаллов. Наиболее сильно это явление должно проявляться при высоких скоростях относительного перемещения тел и при небольших, порядка наноскопических, площадях контактов. Отмечено, что уменьшение дипольного момента вакансии, в которую диффундирует контактный атом, может быть причиной перехода кинематической границы раздела контактирующих кристаллов в квазирасплавленное состояние. Сделан вывод о том, что трение в многоатомном контакте должно качественно отличаться от трения в моноатомном, реализуемом в технике атомно-силовой микроскопии.

PACS: 68.35.Fx, 81.40.Pq, 85.42.+m

1. ВВЕДЕНИЕ

Обзоры экспериментальных и теоретических исследований особенностей трения твердых материалов, представленные в работах [1, 2], показывают, что проблема механизма трения остается актуальной. Большая часть исследований обращается к изучению свойств моноатомного контакта, используемого в технике атомно-силовой микроскопии [3–7]. Их особенностью является обобщение результатов опытов с моноатомным контактом на случай многоатомного, что содержит неявное допущение об одинаковости механизмов трения в обеих системах. Между тем экспериментальная проверка или хотя бы теоретическое обоснование этого допущения отсутствуют.

Другая часть исследований обращается непосредственно к многоатомному контакту. Здесь выделим работы [8–10], в которых за основу представлений о механизме кинематического трения в системе «твердое на твердом» принята идея реализации движения по типу «застревать–проскальзывать» («stick-slip»). Суть этого механизма состоит в том, что один кристалл, движущийся по поверхности другого, который следует принять жестким и закрепленным, испытывает периодические зацепления, преодоление которых приводит исходный кристалл в состояние скольжения. В этом случае некоторые физические характеристики как средние по периоду решетки оказываются отличающимися по абсолютной величине от характеристик, связанных со статическим

*E-mail: valery@meshcheryakov.misa.ac.ru

положением кристаллов. Эти представления лежат в основе исследований [8, 9], которые имеют теоретический характер и в которых рассматривается микроскопический аспект задачи о кинематическом трении. В качестве причины, обеспечивающей зацепленное состояние, предлагается решеточный периодический потенциал, а в качестве величины, усредняющейся по состояниям проскальзывания, — сила трения. Эти же представления лежат в основе экспериментальной работы [10], в которой рассматривается макроскопический аспект задачи. Однако в качестве причины, обеспечивающей зацепленное состояние, предлагаются поверхностные микронеоднородности, а в качестве величины, усредняющейся по состояниям проскальзывания, — сопротивление контакта электронному току.

Не принимая во внимание вопрос, на каком структурном уровне идет проскальзывание, можно увидеть в этих работах общее, а именно: исходные модели строятся на базе статического потенциального рельефа границы раздела. Трудно представить, каким образом движение по типу *stick-slip* может быть реализовано без порождения вакансий межкристаллическими границами (см. например, [11]), или, другими словами, без диффузии атомов по вакантным узлам решетки под действием внешних напряжений. Действительно, если принять характерное значение силы, достаточной для отрыва одного атома от поверхности кристалла, равным по порядку величины 10^{-4} дин [12], то при нагрузках, например, порядка 10^5 дин, число контактных атомов, диффундирующих в вакансии в данный момент времени движения *stick-slip*, имеет величину порядка 10^9 . Роль этих 10^9 атомов в формировании сил трения или электропроводности контактов может быть учтена феноменологически, но возможен и более детальный подход, основывающийся на оценке изменения числа диффундирующих атомов в зависимости от изменения внешних условий проведения эксперимента.

В данной работе мы остановимся на описании динамики образования силового движущегося контакта и дадим оценку изменения числа контактных атомов в зависимости от скорости относительного перемещения тел, находящихся в контакте под действием внешней силы. Разработка старой концепции Томлинсона [13] о связи числа контактных атомов на границе раздела с внешней нагрузкой, предпринятая в работе [14], основывается на решении задачи о движении в кристалле точечного силового диполя. Движущийся диполь моделирует элементарный диффузионный акт перемещения атома из узла решетки в вакансию. В целом диффузия должна определять два процесса. Вначале это процесс установления статического равновесия на границе раздела деформируемого кристалла и абсолютно жесткой опоры в отсутствие их относительного перемещения вдоль соприкасающихся поверхностей. Затем процесс установления динамического равновесия, при котором деформируемый кристалл перемещается по поверхности жесткой опоры, порождая динамический перенос атомов и вакансий, но сохраняя статическое равновесие в направлении, перпендикулярном границе раздела. В этом случае диффузионное перемещение атома можно рассматривать как элементарный акт перехода движущегося кристалла из состояния зацепления к состоянию скольжения, а сформированную в результате многих диффузионных актов границу раздела — как мгновенную картину движения *stick-slip*.

Описание столь детализованного механизма трения с помощью привычной электрон-фононной модели кристалла представляется сегодня вряд ли возможным. Поэтому данная работа ограничивается моделью кристалла в виде бесконечной сплошной среды, содержащей движущиеся точечные силовые источники. Тем не менее именно такой подход позволяет уже на стадии формулировки задачи обнаружить, что силовые

поля движущихся атомов и вакансий, обеспечивающих относительное перемещение кристаллов, должны сплющиваться. Последующий анализ показывает, что следствием сплющивания силовых полей диполей должен быть рост числа контактных атомов взаимодействующих кристаллов. Этот результат приводит к выводам, которые могут найти приложение для анализа зернограничного скольжения в поликристаллах и относительного перемещения нанокристаллов в нанокристаллических материалах.

2. ФОРМИРОВАНИЕ КИНЕМАТИЧЕСКОЙ ГРАНИЦЫ

Будем полагать, что граница раздела кристаллов или отдельных кристаллитов в поликристаллах формируется только лишь диффузионным перемещением атомов по вакантным узлам кристаллической решетки. В этом случае перемещение атомов в вакансии, начальные скорости которых равны нулю, определяет статическую границу раздела. Движущаяся, или кинематическая, граница, образованная равномерным перемещением одного кристалла относительно поверхности другого, определяется перемещением атомов в вакансии, движущейся с начальной скоростью v_0 .

Число n контактных атомов на статической границе определяется внешней нагрузкой и параметрами межатомных взаимодействий [13, 14]. На кинематической границе величина n должна еще зависеть от скорости v_0 . Основанием к этому может быть следующее.

Процесс перемещения атомов в вакансии должен сопровождаться значительными динамическими деформациями решетки, которые могут быть описаны с помощью точечных силовых диполей [14, 15]. Предполагая, что вакансия, движущаяся в направлении зацепленного межатомной связью атома, создает объемную деформацию кристалла, рассмотрим уравнение

$$D_{ik}(\mathbf{r}, t)s_k(\mathbf{r}, t) = F_i(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

для динамических смещений атомов решетки из положений равновесия $s_k(\mathbf{r}, t)$. Дифференциальный оператор $D_{ik}(\mathbf{r}, t)$ определяется в виде матрицы:

$$D_{ik}(\mathbf{r}, t) = \rho_0 \delta_{ik} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - H_{ik,mn} \frac{\partial^2}{\partial x_m \partial x_n},$$

где ρ_0 — плотность среды, $H_{ik,mn}$ — тензор Хуанга [15], описывающий упругие и кристаллографические свойства кристалла. Равномерно движущийся диполь, характеризующий силовое поле перемещающейся вакансии, может быть представлен плотностью силы

$$F_i(\mathbf{r}, t) = -P_{in}^{(0)} \frac{\partial}{\partial x_n} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t), \quad (2)$$

где $P_{in}^{(0)}$ — статический силовой дипольный тензор [15].

Решение уравнения (1) с неоднородностью типа (2) известно из задач о движущихся электродинамических мультиполях [16]. Основным результатом для мультиполя, движущегося со скоростью, не превышающей скорость распространения электромагнитных волн в среде, является эффект сплющивания линий уровней его силового поля. Мера сплющивания зависит от скорости мультиполя.

В деформационной задаче аналогичный эффект должен выражаться в виде сплющивания поля смещений $s_k(\mathbf{r}, t)$ в окрестности вакансии и, следовательно, в виде изменения ее силового состояния, которое может быть описано силовым дипольным тензором. В свою очередь, изменение дипольного тензора вакансии должно приводить к изменению силового состояния зацепленного атома, который диффундирует в эту вакансию. При условиях постоянства внешней нагрузки и статического равновесия контактной пары (в направлении, перпендикулярном границе раздела) изменение силового состояния контактного атома должно приводить к изменению полного числа n контактных атомов на границе раздела кристаллов. Наконец, поскольку мера сплющивания вакансии должна определяться скоростью v_0 перемещения диполя, приходим к выводу о существовании зависимости $n(v_0)$.

3. СПЛЮЩИВАНИЕ УПРУГОГО ПОЛЯ ВАКАНСИИ

Ограничимся решением уравнений (1) для случая бесконечного кристалла, что означает пренебрежение возможными различиями объемной структуры полей деформации вакансий, находящихся на поверхности кристалла и в его объеме. Аппарат теории упругости с использованием концепции точечного силового диполя дает удовлетворительные результаты для дискретной среды [15], но задачи, решаемые в рамках такого подхода, формулируются, в основном, для бесконечного кристалла. Связано это не только с техническими сложностями в учете нетривиальных граничных условий, но и с нецелесообразностью количественного уточнения решений, которые, в лучшем случае, должны иметь качественный характер. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся качественными результатами и количественными оценками не более чем по порядку величин и пренебрежем известными различиями в силах межатомных связей и, следовательно, дипольных моментов вакансий, движущихся по поверхности кристалла и в его объеме.

Будем искать решение уравнений (1) для одной компоненты смещений точки сплошной изотропной среды, описываемой двумя упругими постоянными. Полагая

$$H_{ik,mn} = c_{44}\delta_{ik}\delta_{mn} + (c_{11} - c_{44})\delta_{ikmn},$$

где c_{11} и c_{44} — продольная и поперечная упругие постоянные, получим уравнение

$$\rho_0 \frac{\partial^2 s_x(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} - \left[c_{11} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + c_{44} \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \right] s_x(\mathbf{r}, t) = - \left[P_{xx}^{(0)} \frac{\partial}{\partial x} + P_{xy}^{(0)} \frac{\partial}{\partial y} + P_{xz}^{(0)} \frac{\partial}{\partial z} \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t).$$

После перехода к новым переменным: $\tilde{x} = \xi x$, $\tilde{y} = y$, $\tilde{z} = z$, где $\xi = \sqrt{c_{44}/c_{11}}$, оно принимает следующий вид:

$$\left[\nabla_{\tilde{r}}^2 - \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] s_x(\tilde{\mathbf{r}}, t) = \frac{1}{\sqrt{c_{11}/c_{44}}} \left[\xi P_{xx}^{(0)} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}} + P_{xy}^{(0)} \frac{\partial}{\partial \tilde{y}} + P_{xz}^{(0)} \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} \right] \delta(\tilde{x} - \xi v_{0x} t) \delta(\tilde{y} - v_{0y} t) \delta(\tilde{z} - v_{0z} t), \quad (3)$$

где $c_t = \sqrt{c_{44}/\rho_0}$ — скорость поперечных деформаций среды.

Решение уравнения (3) можно найти с помощью разложения смещений по плоским монохроматическим волнам. Используя стандартные преобразования, получим компоненту Фурье поля смещений:

$$s_x(\mathbf{k}, \omega) = \frac{i [\xi P_{xx}^{(0)} k_x + P_{xy}^{(0)} k_y + P_{xz}^{(0)} k_z] \delta (\xi k_x v_{0x} + k_y v_{0y} + k_z v_{0z} - \omega)}{(2\pi)^3 \sqrt{c_{11} c_{44}} (k^2 - \omega^2 / c_t^2)}.$$

Обратное преобразование Фурье функции $s_k(\mathbf{r}, t)$ дает поле деформации среды в окрестности равномерно движущейся вакансии:

$$s_x(\mathbf{r}, t) = \frac{\gamma_{xl} \gamma_{yt} \gamma_{zt} (\mathbf{P}^* \mathbf{r}^*)}{4\pi r^{*3} \sqrt{c_{11} c_{44}}}, \quad (4)$$

в котором коэффициенты $\gamma_{\alpha k} = 1 / \sqrt{1 - v_{0\alpha}^2 / c_k^2}$, где $\alpha = x, y, z$, соответствуют деформациям, распространяющимся либо с продольной скоростью $c_l = \sqrt{c_{11} / \rho_0}$ при $k = l$, либо с поперечной скоростью c_t при $k = t$. Векторы \mathbf{p}^* и \mathbf{r}^* имеют следующие компоненты:

$$\mathbf{p}^* = (\gamma_{xl} \xi P_{xx}^{(0)}, \gamma_{yt} P_{xy}^{(0)}, \gamma_{zt} P_{xz}^{(0)}), \quad \mathbf{r}^* = (\gamma_{xl} \xi (x - v_{0x} t), \gamma_{yt} (y - v_{0y} t), \gamma_{zt} (z - v_{0z} t)).$$

При $t = 0$ для вакансии, перемещающейся вдоль оси z со скоростью $\mathbf{v}_0 = (0, 0, v_{0z})$, смещения

$$s_x(\mathbf{r}, v_{0z}) = \frac{\xi^2 P_{xx}^{(0)} x + P_{xy}^{(0)} y + \frac{P_{xz}^{(0)} z}{1 - v_{0z}^2 / c_t^2}}{4\pi \sqrt{c_{11} c_{44}} \left(1 - \frac{v_{0z}^2}{c_t^2}\right) \left(\xi^2 x^2 + y^2 + \frac{z^2}{1 - v_{0z}^2 / c_t^2}\right)^3} \quad (5)$$

имеют сплюсненные линии уровней вдоль направления движения вакансии.

Проверим справедливость формулы (5) для предельного значения скорости $v_{0z} = 0$, соответствующего случаю неподвижной границы раздела кристаллов. Полагая, что статический дипольный тензор образован векторной диадой:

$$\mathbf{P}^{(0)} = \begin{vmatrix} f_{0x} x_0 & f_{0x} y_0 & f_{0x} z_0 \\ f_{0y} x_0 & f_{0y} y_0 & f_{0y} z_0 \\ f_{0z} x_0 & f_{0z} y_0 & f_{0z} z_0 \end{vmatrix},$$

где $\mathbf{f}_0(f_{0x}, f_{0y}, f_{0z})$ и $\mathbf{r}_0(x_0, y_0, z_0)$ — соответственно, векторы дипольной силы и ее плеча, для простейшего случая изотропной среды с одной упругой постоянной $\kappa = c_{11} = c_{44}$ и для скорости $v_{0z} = 0$ из формулы (5) вытекает соотношение, описывающее поле смещений упругой среды в окрестности статической вакансии,

$$\mathbf{s}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi \kappa r^3} \mathbf{f}_0(\mathbf{r}_0 \mathbf{r}),$$

которое имеет известный закон убывания r^{-2} [17].

Оценки величины \mathbf{s} для типичных значений упругих постоянных показывают, что смещения (5) составляют величину $10^{-2} - 10^{-1}$ от межатомного расстояния в области с характерной длиной порядка нанометров. Поэтому эффект сплющивания полей смещений на кинематической границе раздела может изменять расстояние между движущимися телами и давать вклад в изменение параметров межатомных взаимодействий.

Очевидно, такой вклад будет конкурирующим по отношению к изменению сил меж-атомных связей при переходе вакансии из объема на поверхность. Тем не менее этим вкладом также пренебрежем.

В дальнейшем статические смещения $s(\mathbf{r})$ не понадобятся. Мы не будем также останавливаться на оценках динамических смещений $s(\mathbf{r}, v_{0z})$ и отличии последних от статических, поскольку, как будет видно из дальнейшего, определяющей физической характеристикой движущегося в кристалле точечного силового диполя является его дипольный момент, а не структура силового поля, которая определяется заданием дипольного тензора. Такой подход согласуется с общепринятой точкой зрения на роль дипольного тензора в описании свойств точечных дефектов [15].

4. ДИПОЛЬНЫЙ МОМЕНТ РАВНОМЕРНО ДВИЖУЩЕЙСЯ ВАКАНСИИ

Компоненты дипольного тензора $P^{(0)}$ не являются независимыми параметрами модели. Так как среда задана упругими постоянными и атомным объемом, то удаление атомного объема на бесконечность, или, что то же самое, образование вакансии ведёт к появлению протяженного силового поля с параметрами f_0 и g_0 , которые должны быть функциями параметров модели. Для модели среды с движущимся источником к независимым параметрам добавляется еще скорость источника v_0 . Таким образом, основываясь на выводе о сплющивании силового поля движущегося источника, можно поставить вопрос о поиске зависимости векторов f_0 и g_0 или их комбинации от вектора v_0 .

Воспользуемся тем, что функция смещений (5), будучи приложенной к описанию смещений узлов атомной решетки, должна быть нормирована на объем образования диполя Ω . Так как в данной задаче диполь описывает силовое поле вакансии, примем величину Ω равной атомному объему. Тогда $\Omega = m/\rho_0$, где m — масса атома. В отсутствие экспериментальных данных по числу n контактных атомов имеет смысл проводить оценки не точнее порядков величин. Поэтому известными возможными отличиями объема образования вакансии от Ω можно пренебречь.

Примем, что исходное силовое поле в окрестности вакансии сферически-симметрично. В этом случае компоненты дипольной силы $f_{0x} = f_{0y} = f_{0z}$, компоненты плеча дипольной силы $x_0 = y_0 = z_0$ и компоненты силового дипольного тензора $P_{ik}^{(0)} = f_{0z} z_0$. Нормировочный интеграл

$$\int s(\mathbf{r}, v_{0z}) dS = \Omega \quad (6)$$

будем вычислять в приближении $\xi = 1$, для которого компонента смещений равна

$$s_\alpha = \frac{\gamma f_{0z} z_0 (x + y + \gamma^2 z)}{4\pi\kappa\sqrt{(x^2 + y^2 + \gamma^2 z^2)^3}},$$

где $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v_{0z}/c_\kappa$, $c_\kappa = \sqrt{\kappa/\rho_0}$: В этом случае интеграл (6) принимает следующий вид:

$$A \int \frac{[2xy + (\gamma^2 + 1)(x + y)z] dS}{r\sqrt{(x^2 + y^2 + \gamma^2 z^2)^3}} + A \int \frac{dS}{r\sqrt{x^2 + y^2 + \gamma^2 z^2}}, \quad (7)$$

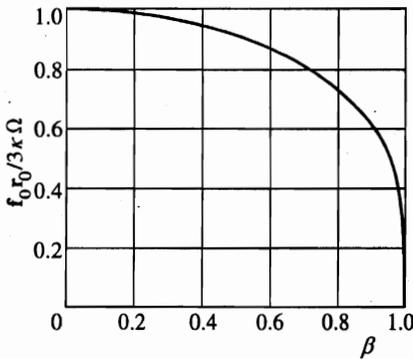


Рис. 1. Изменение относительного дипольного момента равномерно движущейся вакансии

где введено обозначение $A = \gamma f_{0z} z_0 / 4\pi\kappa$. Переход к сферическим координатам показывает, что первый интеграл в (7) равен нулю, а второй принимает вид

$$A \int \frac{\sin\theta d\theta}{\sqrt{\sin^2\theta + \gamma^2 \cos^2\theta}} \tag{8}$$

Вычисление интеграла (8),

$$\frac{2\pi A}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \int_{-1}^1 \frac{du}{\sqrt{u^2 + 1/(\gamma^2 - 1)}} = \frac{2\pi A}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \ln \left| \frac{\sqrt{1 + 1/(\gamma^2 - 1)} + 1}{\sqrt{1 + 1/(\gamma^2 - 1)} - 1} \right|,$$

и переход к параметру β дают значение интеграла

$$\int \mathbf{s}(\mathbf{r}, v_{0z}) d\mathbf{S} = \frac{f_{0z} z_0}{2\kappa\beta} \ln \left| \frac{1 + \beta}{1 - \beta} \right| = \frac{f_{0z} z_0 \operatorname{arth} \beta}{\kappa\beta} \tag{9}$$

Подставляя (9) в исходный нормировочный интеграл (6) и возвращаясь к векторным обозначениям, получим скалярное произведение

$$\mathbf{f}_0 \mathbf{r}_0 = \frac{3\beta}{\operatorname{arth} \beta} \kappa\Omega, \tag{10}$$

характеризующее изменение компонент дипольного тензора равномерно движущегося силового диполя в зависимости от его скорости.

На рис. 1 приведена иллюстрация формулы (10). Из графика функции $\beta / \operatorname{arth} \beta$ следует, что увеличение скорости диполя, движущегося в упругой среде, сопровождается уменьшением его дипольного момента. Физическим основанием уменьшения момента является условие сохранения объема образования диполя при сплющивании его силового поля. Это условие требует компенсации роста величины смещений деформируемой среды с ростом скорости диполя за счет уменьшения дипольной силы и плеча дипольной силы. Другими словами, при постоянном объеме образования вакансии становится менее жесткой с ростом ее скорости. При $\beta = 1$, т. е. при движении диполя со скоростью звука, силовой дипольный момент обращается в нуль. Можно сказать, что линейная сплошная среда «не видит» собственного дипольного силового источника, движущегося со скоростью распространения деформаций в этой среде. При $\beta = 0$

формула (10) приводит к известному соотношению $f_0 r_0 = 3\kappa\Omega$ [14], определяющему компоненты дипольного тензора статического силового диполя.

Уменьшение дипольного момента вакансии, в которую диффундирует атом, находящийся на границе раздела сред, приводит к уменьшению энергии образования вакансии E , так как $E \propto P^{(0)}(\beta)$, и уменьшению энергии самодиффузии. Это может соответствовать переходу границы раздела в квазирасплавленное состояние, аналогичное тому, которое наблюдается в частицах малых размеров [18]. В свою очередь, квазиплавление границ раздела может быть причиной как уменьшения силы кинематического трения по сравнению с силой трения покоя, так и роста электросопротивления движущегося контакта по сравнению с неподвижным. Подробная проработка этих причин требует привлечения более сложного гамильтониана взаимодействий, чем тот, который приводит к уравнениям (1). В частности, это относится к задаче об электропроводности кинематического контакта, решение которой связано с необходимостью выяснения особенностей просачивания электронов через границу раздела в системе ионов, обладающих поступательными степенями свободы.

Найденное соотношение (10) позволяет также утверждать, что уменьшение дипольного момента вакансии, в которую диффундирует контактный атом, должно изменять число пар атом-вакансия, обеспечивающих кинематический контакт твердых тел.

5. ЧИСЛО КОНТАКТНЫХ АТОМОВ НА КИНЕМАТИЧЕСКОЙ ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА

Число контактных атомов можно найти, воспользовавшись условием статического равновесия кристаллов вдоль оси x , перпендикулярной направлению их относительного перемещения. Для внешней силы F_0 , перпендикулярной границе раздела кристаллов, число контактных атомов должно быть равно

$$n(\beta) = \frac{F_0}{f_{0x}(\beta)}. \quad (11)$$

При $f_{0x} < F_0/n$ внешняя сила в пересчете на один атом границы раздела превышает значение силы межатомной связи (без учета отличия поверхностных связей от объемных), что приводит к диффузионному перераспределению атомов на границе раздела кристаллов под действием силы F_0 и к увеличению числа атомов n .

Величина f_{0x} неизвестна, но входит в скалярное произведение (10). Дополнительные соотношения, позволяющие определить f_{0x} , можно установить из решения динамической задачи о движущемся атоме кристалла. Эта задача основывается на уравнении (1), в котором силовая неоднородность,

$$F_i(\mathbf{r}, t) = f_i(t)\delta(\mathbf{r}) - P_{in}(t)\frac{\partial}{\partial x_n}\delta(\mathbf{r}), \quad (12)$$

определяется динамическим дипольным тензором

$$P(t) = \begin{vmatrix} f_{0x}x_0 & f_{0x}y_0 & f_{0x}[z_0 + z(t)] \\ f_{0y}x_0 & f_{0y}y_0 & f_{0y}[z_0 + z(t)] \\ [f_{0z} + f_z(t)]x_0 & [f_{0z} + f_z(t)]y_0 & [f_{0z} + f_z(t)][z_0 + z(t)] \end{vmatrix},$$

где $\mathbf{f}(f_x(t), f_y(t), f_z(t))$ — вектор силы, действующей на атом с массой m , $\mathbf{r}(x(t), y(t), z(t))$ — вектор перемещения атома.

Решение уравнения (1) с плотностью силы (11) дано в работе [14] в приближении волновой зоны. Результатом является частота поля предельных деформаций,

$$\omega = (16\kappa c_{\kappa}/m)^{1/3}, \quad (13)$$

на которой происходит поглощение энергии в системе, и связь векторов дипольной силы и ее плеча,

$$\mathbf{f}_0 = -m\omega^2 \mathbf{r}_0, \quad (14)$$

обеспечивающая условие равенства нулю моментов сил, возникающих при деформации кристалла.

Совместное решение уравнений (10), (13) и (14) дает компоненту вектора дипольной силы

$$f_{0x}(\beta) = f_{0x}(0) \sqrt{\frac{\beta}{\operatorname{arth} \beta}}, \quad (15)$$

где $f_{0x}(0) = 16^{1/3} \kappa \Omega^{2/3}$, и компоненту вектора плеча дипольной силы

$$x_0(\beta) = (\Omega/16)^{1/3} \sqrt{\beta / \operatorname{arth} \beta},$$

которые зависят от скорости равномерного перемещения кристалла относительно жесткой опоры.

Полагая величину силы F_0 заданной, из формул (11) и (15) получаем, что число контактных атомов на кинематической границе раздела в системе «кристалл — абсолютно жесткая опора» равно

$$n(\beta) = n(0) \sqrt{\frac{\operatorname{arth} \beta}{\beta}}, \quad (16)$$

где $n(0) = F_0/f_{0x}(0)$ — число контактных атомов на неподвижной границе.

Анализ формул (10) и (16) показывает, что уменьшение дипольного момента вакансии, вызванное сплющиванием ее силового поля, должно приводить к увеличению числа контактных атомов с ростом скорости кристалла, движущегося относительно опоры. Так как число контактных атомов на неподвижной границе раздела изменяется в пределах от значения $n(0) = 1$, которое реализуется в атомно-силовом микроскопе, до принципиально возможного значения, ограниченного числом атомов на поверхности кристалла $n(0) \approx N^{2/3}$, где N — полное число атомов образца, то для оценок можно взять промежуточный и наиболее типичный случай $n(0) \approx 10^9$, соответствующий нагрузке $F_0 = 10^5$ дин.

Например, полагая, что по порядку величины $c_{\kappa} \sim 10^5$ см/с, для кристалла или границы зерна поликристалла, движущихся со скоростью $v_0 = 10^2$ см/с, получим приращение числа контактных атомов

$$\Delta n = n(\beta) - n(0),$$

равное $\Delta n(10^{-3}) \approx 10^2$. Еще пара оценок для других значений β дает $\Delta n(10^{-2}) \approx 10^4$ и $\Delta n(10^{-1}) \approx 10^6$. Эти результаты проиллюстрированы на рис. 2. Логарифмический

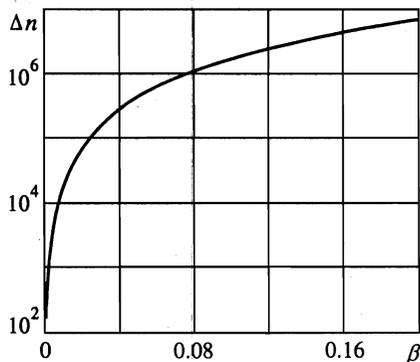


Рис. 2. Зависимость приращения числа контактных атомов от скорости относительного смещения кристаллов, имеющих с статическим состоянием число контактных атомов $n(0) \approx 10^9$

характер зависимости $\Delta n(\beta)$ обусловлен обращением в нуль дипольного момента вакансии при $\beta \rightarrow 1$. При достаточно высоких скоростях относительных перемещений кристаллов изменение числа контактных атомов может быть весьма значительным. Из этого следует, что эффект сплющивания силового поля вакансии, которым можно пренебречь для случая одного диффузионного акта на достаточно протяженной границе, может дать заметный вклад в изменение свойств, зависящих от числа контактных атомов на кинематической границе раздела. Таким образом, явление сплющивания вакансий и изменения числа контактных атомов может быть особенно значимым в двух крайних случаях: при высоких скоростях перемещений тел, реализуемых, например, при относительных перемещениях границ зерен [19], и при небольших, порядка наноскопических, размерах площадей контактов, что имеет место для нанокристаллических материалов. В последнем случае приближение числа контактных атомов $n(\beta) \approx N^{2/3}$ к числу атомов на поверхности движущегося нанокристалла или отдельного кристаллита нанокристаллического материала обуславливает резкое возрастание влияния отдельных полей деформации на свойства не только границ их раздела, но и на их объемные свойства [20]. Так, смягчение фононного спектра в области его длинноволновой границы может приводить к возникновению особенностей при протекании тока через контактную пару.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Решение задачи о дипольном моменте равномерно движущегося в кристалле силового источника показывает, что изменение свойств кинематической границы раздела кристаллов по отношению к статической границе связано с необходимостью принимать во внимание поля деформации кристалла, обусловленные динамикой пары атом-вакансия. Перемещение атомов кристалла из статических равновесных позиций в движущиеся приводит к сплющиванию силовых полей вакансий и изменению числа контактных атомов. Отсюда следует, что трение в многоатомном контакте должно качественно отличаться от трения в моноатомном. Этот вывод накладывает ограничение на возможное обобщение результатов опытов с моноатомным острием атомно-силового микроскопа на случай систем с многоатомными контактами.

Качественное решение задачи о сплющивании силового поля вакансии не требует ни знания особенностей межатомных взаимодействий (что связано с учетом харак-

тера проводимости материалов), ни учета отличия характера объемной диффузии от поверхностной. В то же время включение этих факторов позволило бы дать более точные количественные оценки и, следовательно, рассмотреть конкретную экспериментальную ситуацию. С другой стороны, сегодня нет возможности наблюдения *in situ* за динамикой образования силового контакта, хотя не исключен вариант измерения числа контактных атомов в зависимости от относительной скорости перемещения тел. Такой эксперимент может быть основан на измерении величины тока, протекающего через контактную пару. В этом случае, однако, изложенный в статье подход будет недостаточным для объяснения изменения тока. Увеличение числа контактных атомов при движении кристалла должно увеличивать электропроводность всего контакта, являющегося параллельной группой точечных контактов; но уменьшение дипольного момента вакансий может в значительной степени уменьшить электропроводность отдельного точечного контакта. Учет последнего требует существенного усложнения в постановке задачи о кинематическом трении.

Авторы благодарят А. Г. Ляпина и О. А. Казакова за обсуждение результатов работы и критические замечания.

Литература

1. I. L. Singer, J. Vac. Sci. Technol. A **12**, 2605 (1994).
2. U. D. Schwarz, O. Zworner, P. Koster, and R. Wiesendanger, Phys. Rev. B **56**, 6987, 6997 (1997).
3. W. Zhong and D. Tomanek, Phys. Rev. Lett. **64**, 3054 (1990).
4. Den Nijs Marcel, Phys. Rev. Lett. **64**, 435 (1990).
5. Motohisa Hirano and Kasumasa Shinjo, Phys. Rev. B **41**, 11837 (1990).
6. M. A. Lantz, S. J. O' Shea, M. E. Welland, and K. L. Johnson, Phys. Rev. B **55**, 10776 (1997).
7. R. J. A. Van den Oetelaar and C. F. J. Flipse, Surface Sci. **384**, L828 (1997).
8. J. V. Sokolov, Thin Solid Films **206**, 208 (1991).
9. A. Buldum and S. Ciraci, Phys. Rev. B **55**, 2606 (1997).
10. М. Е. Левинштейн, С. Л. Румянцев, ФТТ **35**, 953 (1993).
11. В. В. Горбунов, Б. М. Даринский, ФТТ **34**, 1059 (1992).
12. G. Binnig, C. F. Quate, and Ch. Gerber, Phys. Rev. Lett. **56**, 930 (1986).
13. I. Tomlinson, Phil. Mag. **7**, 905 (1929).
14. В. В. Мещеряков, ФТТ **37**, 43 (1995).
15. Г. Лейбфрид, Н. Бройер, *Точечные дефекты в металлах*, Мир, Москва (1981), с. 188.
16. В. В. Батыгин, И. Н. Топтыгин, *Сборник задач по электродинамике*, Наука, Москва (1970), с. 157.
17. М. А. Кривоглаз, *Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами*, Наука, Москва (1967), с. 69.
18. Э. Л. Нагаев, УФН **162**, 49 (1992).
19. С. Г. Псахье, К. П. Зольников, Письма в ЖТФ **23**, 44 (1997).
20. В. В. Мещеряков, ЖЭТФ **111**, 1845 (1997).