

# 微尺度静动摩擦转变行为的机理研究\*

武鑫<sup>1,2</sup> 胡剑桥<sup>1</sup> 刘小明<sup>1,2\*\*</sup>

(<sup>1</sup>中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室,北京,100190)(<sup>2</sup>中国科学院大学工程科学学院,北京,100049)

**摘要** 微尺度接触与摩擦行为广泛存在于各种重要工业器件与系统中,随着各类机电系统高集成化和微小型化的发展,摩擦对器件的影响越发不可忽视.在微尺度下,摩擦行为表现出对界面粘性与接触尺寸的强依赖性,认识微尺度下静动摩擦转变对控制摩擦、减小能耗具有重要的意义.本研究工作采用分子动力学方法对微尺度摩擦行为的静动转变过程开展了研究,通过发展一系列可修正势函数来定量调控摩擦界面物性,进而阐明了界面粘性与界面接触刚度对静摩擦系数的影响规律并揭示了两者的竞争机制.此外,本工作还研究了微尺度下临界静摩擦系数的尺寸效应,观察到了临界静摩擦力的饱和现象并通过接触层云图揭示了饱和现象的微观机制.

**关键词** 摩擦,原子级光滑界面,分子动力学,界面势能,模型长度

DOI:10.19636/j.cnki.cjasm42-1250/o3.2024.018

## 0 引言

摩擦接触是普遍存在于日常生活和工业生产中的重要界面力学现象.随着人类生活智能化水平的提高和微纳制造技术的不断发展,许多在环境、交通、健康、生物和航空航天等领域拥有重要潜在应用的新型微纳机电和传感器件不断涌现,由于器件尺寸急剧减小,材料比表面积迅速增大,摩擦和磨损问题成了许多微型器件设计和应用的突出瓶颈.因此,理解并控制摩擦对提高设备可靠性、高效利用能源等方面有重要的意义<sup>[1]</sup>.

经典库仑摩擦定律认为接触面积与摩擦系数无关,摩擦力与法向压力成正比.库仑模型能描述很多宏观干摩擦现象,但由于实验手段的限制,相当长历史时间人类都无法清晰观察真实的摩擦界面,因此对摩擦的机理缺乏本质认识.直到上世纪随着显微技术的发展,研究者发现宏观看似紧密接触的界面其实是由许多尺寸不同的微小突起(asperity)接触对构成的,因此真实接触面积远小于表观接触面积;Bowden和Tabor<sup>[2]</sup>指出了真实接触面积的重要性,

成为摩擦领域继库仑摩擦定律之后又一个重要结论.到本世纪初,Fineberg等<sup>[3]</sup>通过设计精巧的光弹性滑动实验发现宏观摩擦界面在滑动前的锋面传播现象,Fineberg等<sup>[4-6]</sup>还通过进一步的实验说明锋面传播与裂纹扩展的相似性,认为锋面传播动力学也能用断裂力学中裂纹面能量平衡的观点来类比研究.Rubinstein等<sup>[7]</sup>通过实验研究了界面上不同速度的波各自减少真实接触面积强弱程度;Maegawa等<sup>[8]</sup>实验探究了不均匀法向载荷对锋面传播的影响;Braun等<sup>[9]</sup>与Trømborg等<sup>[10]</sup>通过小块-弹簧模型解释了锋面传播现象;Katano等<sup>[11]</sup>以锋面传播实验结果为基础,在摩擦系数表达式中添加锋面传播特征长度项,拟合得到新的摩擦规律;Trømborg等<sup>[12]</sup>与Bar-Sinai等<sup>[13]</sup>对慢速锋面向快速锋面转变提出了不同的机理,前者认为是局部滑动后发生弛豫导致了转变,后者则认为速度强化机制导致了转变;Bonfanti等<sup>[14]</sup>与Barras等<sup>[15]</sup>使用断裂力学观点研究微观摩擦,与实验工作进行了联系.以上工作全面地研究了锋面传播现象,讨论了宏观界面的摩擦动力学过程.在微观摩擦领域,研究者主要使用分子动力学模拟与原子力显微镜实验两种手段进行

\* 国家自然科学基金项目(12022210,12032001)和青年托举项目(2023QNRC001)资助.

2024-04-30 收到修改稿, 2024-05-11 网络首发.

\*\* 通讯作者. E-mail: xiaomingliu@lnm.imecb.ac.cn.

研究, Yifei Mo 等<sup>[16]</sup>使用模拟探究了如何定义原子级接触的真实接触面积; Qunyang Li 等<sup>[17-19]</sup>使用原子力显微镜进行了一系列实验, 探讨了摩擦的老化效应 (ageing effect) 与尺度、速度等对摩擦系数的影响; Jianping Gao 等<sup>[20]</sup>类比气体系统, 证明摩擦系统具有可预测的平均值, 对库仑摩擦定律给出了微观解释. 以上工作在微观尺度考察了摩擦行为, 提供了理解宏观摩擦行为的理论依据.

微观尺度下的摩擦行为与宏观摩擦在形式上相似: 都能视为界面间发生了相对滑动. 但机制又非常不同, 随着比表面积的减小, 界面作用不可忽视. 在静动摩擦转变这方面, Fineberg 等<sup>[21]</sup>通过实验验证了宏观界面静摩擦系数并不是一个常数, 而与法向压力相关; Otsuki 等<sup>[22, 23]</sup>通过有限元模拟讨论了静摩擦系数随外载和模型尺寸的变化, 建立了黏滑阶段的一维模型; Binqun Luan 等<sup>[24]</sup>通过分子动力学模拟研究单个突起与不同粘性界面的接触, 主要关注了滑动摩擦力的变化; Jianqiao Hu 等<sup>[25]</sup>通过分子动力学模拟研究了不同尺寸的单个突起的摩擦情形, 考察了突起尺寸、滑动速度、晶体取向等的影响; Zhang 等<sup>[26]</sup>使用原子力显微镜探究了界面粘性对动摩擦的影响; Zhao Deng 等<sup>[27]</sup>使用原子力显微镜研究石墨烯的摩擦, 观察到了负摩擦系数; Pugno 等<sup>[28]</sup>通过类比粘性接头的解, 得到预测石墨烯/石墨烯界面摩擦力的公式, 指出当模型在滑动方向足够长时, 摩擦力会发生饱和. 这些工作充分体现了界面作用在微观尺度的重要影响与微观摩擦的独特性. 但它们也存在局限性, 具体来说, 这些研究往往只关注固定物性的摩擦界面, 而忽略了不同界面基本物性对摩擦行为的重要影响. 这种局限性可能导致我们对摩擦现象的理解不够全面和深入<sup>[21-23, 26, 27]</sup>.

如上所述, 微观尺度下的静动摩擦整体转变过程还有待研究. 本文基于可调控的 Morse 势函数, 采用分子动力学方法模拟了微观尺度不同物性以及不同接触尺寸的界面静动摩擦转变行为, 阐明了界面物性造成的竞争效应与接触尺寸对摩擦动力学的影响.

## 1 模型与方法

本文使用 LAMMPS<sup>[29]</sup>进行分子动力学模拟,

采用 LJ 单位制, 能量基准单位为  $\epsilon_0$ 、长度基准单位为  $r_0$ 、时间基准单位为  $t_0$ . 模拟模型如图 1 所示, 由两部分组成: 刚性基底与弹性块体. 基底与块体是同种 FCC 晶体 (晶格常数  $a = \sqrt{2}r_0$ ), 晶体取向都为  $x$ -[100],  $y$ -[010],  $z$ -[001], 块体在  $x, y, z$  三个方向的尺寸分别为:  $L, 15a, 12a$ , 模拟参数如表 1 所示. 记体作用势为  $U_0$ , 界面作用势为  $U$ ,  $U$  等于  $U_0$  乘上一个小于 1 的系数.  $U_0$  是修正 Morse 势函数<sup>[30]</sup>. 其表达式为:

$$\frac{U_0(r)}{\epsilon_0} = \begin{cases} e^{-2\alpha_0(r-r_0)} - 2e^{-\alpha_0(r-r_0)} & (r < 1.1r_0) \\ a_3r^3 + a_2r^2 + a_1r^1 + a_0 & (1.1r_0 \leq r < r_c) \\ 0 & (r_c \leq r) \end{cases} \quad (1)$$

其中  $U_0(r)$  是两个相距  $r$  的原子之间的势能,  $\epsilon_0$  是势能阱深度,  $r_0$  是平衡距离,  $\alpha_0$  控制原子键刚度, 截断半径  $r_c$  是势能作用最远范围. 参数  $a_0 \sim a_3$  是保证势能与作用力连续性的拟合参数. 使用该修正 Morse 势函数的优势在于能通过改变截断半径  $r_c$  来定量调控材料和界面物性<sup>[31-34]</sup>. 当原子间距大于平衡距离 1 小于  $r_c$  时就会互相吸引, 这是界面上黏附力的来源, 因此通过直接取  $r_c$  等于 1 就能得到无黏附力界面 (即无粘性界面). 刚性基底尺寸足够大, 厚度足够厚, 其边界不会对块体的行为造成影响.

表 1 模拟参数

Table 1 Parameters for the simulation

参数	参数值
时间步长 ( $t_0$ )	0.001
温度 ( $\epsilon k_B^{-1}$ )	0.001
$F_{x\text{-apply}}$ 加载率 $k(\epsilon r_0^{-1} t_0^{-1})$	$10^{-6}$

模拟过程中, 设定模拟边界为 pps, 先对系统进行能量最小化, 随后设定 NVE 系综, 使用 Langevin 热浴控制系统温度为  $0.001\epsilon/k_B$  ( $k_B$  是玻尔兹曼常量), 得到稳定模型后, 在块体的上半部分加载负  $z$  方向的恒定压强  $\sigma_{zz} = -0.333\epsilon r_0^{-3}$ , 此过程中系统保持平衡, 随后从 0 开始线性加载  $x$  方向推力  $F_{x\text{-apply}}$ .

本文对不同界面势能  $U$  对摩擦的影响以及  $x$  方向长度  $L$  对摩擦的影响进行了研究. 在研究  $U$  影

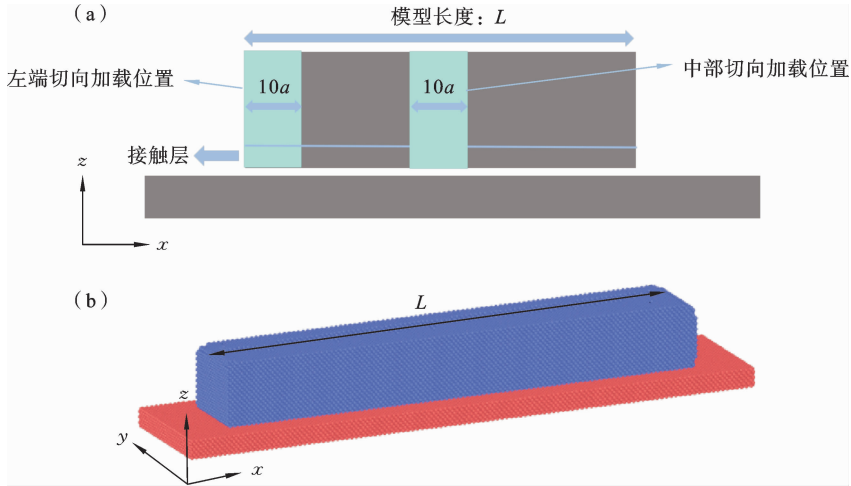


图 1 (a) 模型示意图,亮蓝色部分为推力  $F_{x\text{-apply}}$  加载区域,当研究界面势能影响时分别在块体左端与中部加载,当讨论模型长度影响时,只在块体中部加载; (b) 分子动力学模型图<sup>[35]</sup>

Fig. 1 (a) Schematic illustration of simulation model. The bright blue part represents the lateral force  $F_{x\text{-apply}}$  loading area. When studying the effect of interfacial potential energy, it is loaded in the left end and middle of the block, respectively. When studying the effect of model's length, it is only loaded in the middle of the block; (b) Schematic illustration of model, obtained from OVITO post-processing software<sup>[35]</sup>

响时,固定模型长度  $L$  为  $100a$ ,选取 8 种由弱到强的界面势能  $U(0.0005U_0-0.01U_0)$ ,计算有粘性情形与无粘性情形,并分别从块体左端与中部进行切向加载.在研究  $L$  影响时,选取三种势能  $(0.001U_0, 0.01U_0, 0.1U_0)$ ,  $L$  从  $30a$  到  $800a$  之间变化,只考

虑粘性界面,从块体中部切向加载.

取块体与基体的  $x$  方向作用力为界面摩擦力  $F_x$ ,  $F_x$  的峰值作为极限静摩擦力,在  $F_x$  突破极限静摩擦力后模拟停止.取极限静摩擦力与法向载荷的比值为静摩擦系数  $\mu_s$ .将块体最底部厚度为  $2a$

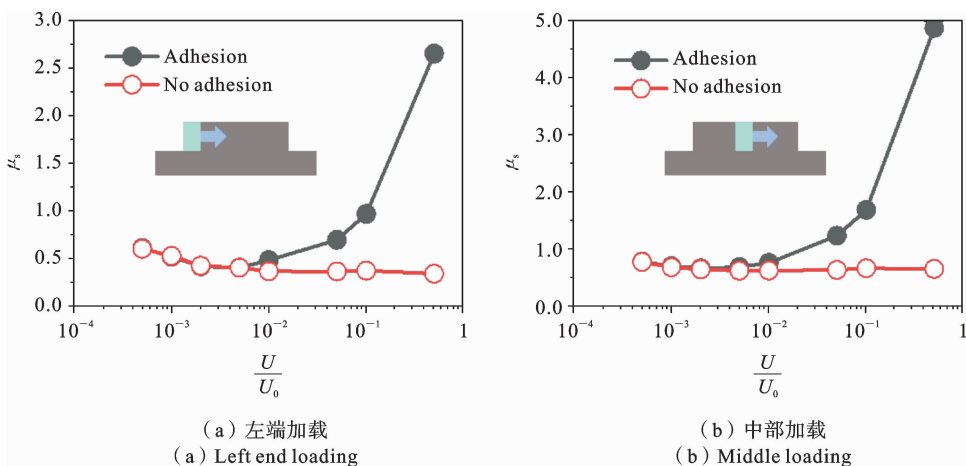


图 2 改变界面势能与粘性模拟结果,横轴是  $U$  与  $U_0$  的比值,纵轴是静摩擦系数  $\mu_s$ ,黑色实心圆圈代表有粘性模型,红色空心圆圈代表无粘性模型

Fig. 2 Simulation results of changing interface potential energy and viscosity. The horizontal axis is the ratio of  $U$  to  $U_0$ , and the vertical axis is the static friction coefficient  $\mu_s$ . Black solid circle represents viscous models, while red hollow circle represents non-viscous models

的一层定义为接触层,通过 Python 后处理得到接触层不同位置的信息.

## 2 界面粘性与接触刚度的竞争机制

本小节通过调控界面势能  $U$  与界面粘性,阐明了静摩擦系数随界面势能的非线性变化现象.如图 2 所示,给出了不同界面势能下不同区域加载的静摩擦系数变化规律.

无论是左端加载还是中部加载,在界面势能强度较低时( $U/U_0 \leq 0.005$ ),静摩擦系数  $\mu_s$  随界面势能强度增加而逐渐减小,且有无界面粘性不影响  $\mu_s$ ,表现出对界面粘性的弱依赖性;当界面势能强度较高时( $U/U_0 > 0.005$ ),无粘性模型的  $\mu_s$  几乎不再

随界面势能强度变化,而有粘性模型的  $\mu_s$  随着界面势能强度增加而不断增加,无粘性模型与有粘性模型  $\mu_s$  的差别界面强度随着增加而越发显著.图 2 说明静摩擦系数  $\mu_s$  随界面势能  $U$  是非线性变化的.

图 3 是块体与基底平衡时的界面势能面示意图,由于块体与基底都是 FCC 晶体,其表面的势能面是周期的,当界面受压,块体与基底的势能面会互相嵌入一定距离,设平衡距离为  $h$ .在  $U$  不变时,外界压力越大, $h$  越大,势能面越难以发生侧向错动,摩擦力越大,当  $h$  达到界面势阱最深处时抗拒稳定势能面滑动的力最大,记为  $\gamma$ .由于在弹性变形前提下,很难将界面压缩到势阱最深处,可以合理假设  $\gamma$  是常数.

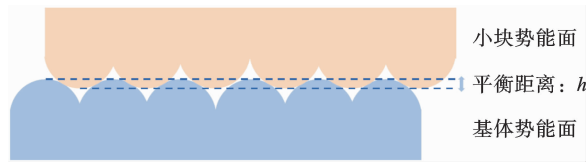


图 3 平衡界面的势能面示意图

Fig. 3 Schematic illustration of potential energy surface of balance interface

由图 3 可知,此时摩擦力来源为两部分:势能面抵抗滑动的阻力与界面间吸引力(黏附力).势能面抵抗滑动阻力在形式上类似宏观界面几何互锁的影响,然而由于原子间排斥力相当大,在弹性前提下块体与基底之间是不可能实际接触的.所以界面上的“互锁”是势能面之间的互锁,可以用界面法向接触刚度来描述互锁深度.在法向外载恒定时,界面势能  $U$  越小,法向接触刚度越小,平衡距离  $h$ (即互锁深度)越大,因此势能面抵抗滑动阻力越大,但粘性与  $U$  成比例,此时粘性提供黏附力变小.还要注意,当  $U$  改变时,势能面形状会发生改变,本文忽略势能面形状变化影响,因为在弹性范围内模型所受法向外载并不大,势能面被压缩程度非常小.

因此,在平衡界面上摩擦力组成为:抵抗稳定势能面滑动的力  $\lambda\gamma$ (界面法向接触刚度的影响)与抗拒剪切的黏附力  $\eta$ (粘性的影响).

于是摩擦力可以写成:

$$f_t = \eta + \lambda\gamma \quad (2)$$

则静摩擦系数  $\mu_s$  为:

$$\mu_s = \frac{F_t}{F_N} = \frac{\eta}{F_N} + \frac{\lambda}{F_N}\gamma \quad (3)$$

对于无粘性模型有:

$$\mu_s = \frac{F_t}{F_N} = \frac{\lambda}{F_N}\gamma \quad (4)$$

其中  $\lambda$  是小于 1 的、与法向力相关的正数, $\eta$  与势能成正比.对于式(2),前人已经提出类似的摩擦力构成<sup>[20]</sup>,但没有指出接触刚度与粘性之间的竞争机制.在我们的模型中,法向载荷不变,只改变了界面势能  $U$ .当  $U$  很小时,黏附力  $\eta$  很小,摩擦力来源几乎就是  $\lambda\gamma$ , $\mu_s$  约等于  $\frac{\lambda}{F_N}\gamma$ ,当  $U$  缓慢增加, $h$  减小,势能面滑动更容易, $\lambda$  减小,因此  $\mu_s$  会减小,这个阶段粘性几乎不起作用( $U/U_0 \leq 0.005$ ),接触刚度主导摩擦,因此图 2 中粘性模型与无粘性模型的  $\mu_s$  一致.当  $U$  继续增加到足够大( $U/U_0 > 0.005$ ),界面刚度越来越大,平衡距离  $h$  稍作改变就能与法向载荷平衡,因此界面法向接触刚度的贡献  $\lambda\gamma$  几乎不变,

所以无粘性时  $\mu_s$  随  $U$  增加几乎不变. 此时黏附力  $\eta$  随  $U$  增加, 影响不可忽视, 界面粘性开始主导摩擦, 因此有粘性模型的  $\mu_s$  会随  $U$  增加而显著增加.

下面分别考虑界面粘性与法向接触刚度的影响来继续论证上述竞争机制. 考虑粘性影响时, 对块体施加沿  $z$  轴正向准静态增加的拉力, 此时势能面错动不会阻碍拉开过程, 即排除了界面法向接触刚度的影响, 抵抗拉开过程的阻力就是块体与基底的吸

引力, 它全部由黏附力贡献. 在拉开过程中, 吸引力会先增大后减小, 用吸引力最大值表征黏附力, 将其除以接触面积, 就得到该界面势能下单位面积所受黏附力. 图 4(a) 是单位面积黏附力  $F_{\text{viscosity}}$  随  $U$  的变化,  $F_{\text{viscosity}}$  与  $U$  成线性关系. 在  $U/U_0 \leq 0.005$  时,  $F_{\text{viscosity}}$  的影响很小, 可以忽略. 由于黏附力只与原子间距相关, 与作用方向无关, 因此  $F_{\text{viscosity}}$  能表征 (2) 式中粘性对摩擦力的贡献  $\eta$ .

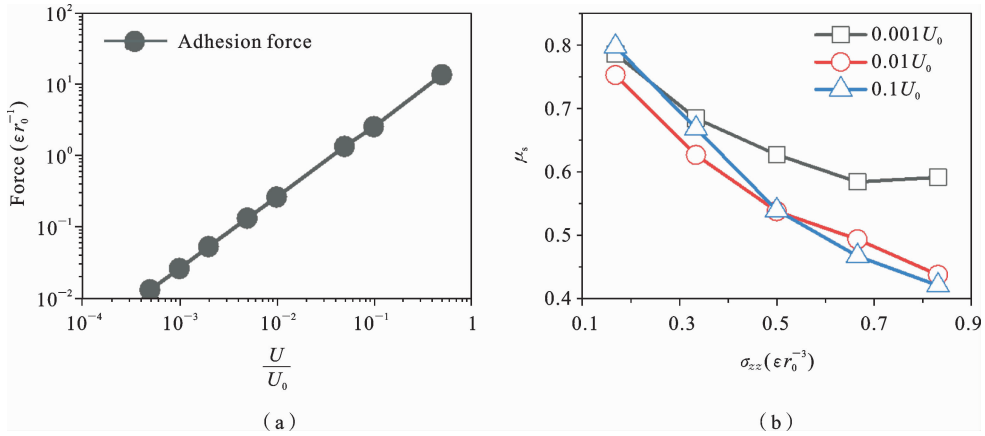


图 4 (a) 不同界面势能模型的单位面积黏附力; (b) 不同界面势能的无粘模型不同法向压强下的静摩擦系数

Fig. 4 (a) Viscosity force per unit area of models with different interface potential energies; (b) Static friction coefficient of non adhesive models with different interface potential energies under different normal pressures

图 4(b) 是取  $U$  为  $0.001U_0, 0.01U_0, 0.1U_0$ , 对无粘模型中部加载改变法向压强  $\sigma_{zz}$  (即法向外载  $F_N$ ) 的模拟结果, 此时摩擦系数等于  $\frac{\lambda}{F_N} \gamma$ , 对所有势能, 摩擦系数随着  $F_N$  增加而减小. 假设  $\gamma$  不随外载变化, 这是因为  $F_N$  增加会使势能面平衡距离  $h$  增加,  $\lambda$  随之增加, 但  $\lambda$  增加的幅度没有  $F_N$  大, 因此最终摩擦系数随着  $F_N$  增加而减小. 对  $U$  为  $0.1U_0$  模型, 当增加  $F_N$  足够大时 ( $\sigma_{zz} \geq 0.666\epsilon r_0^{-3}$ ), 摩擦系数不再变化, 这是因为界面势能已足够大, 在压缩到一定程度时平衡距离  $h$  稍微改变就能与法向载荷平衡.

本文继续通过如下模拟来讨论势能面法向接触刚度的影响, 同时说明  $\gamma$  与势能面形状不变的假设的合理性. 如下图所示.

使用界面势能  $U = 0.001U_0$  的模型来进行模拟, 不考虑界面粘性, “VL”代表“Velocity Load”. 此时不加载法向力与切向外载, 并限制块体在  $y, z$  方

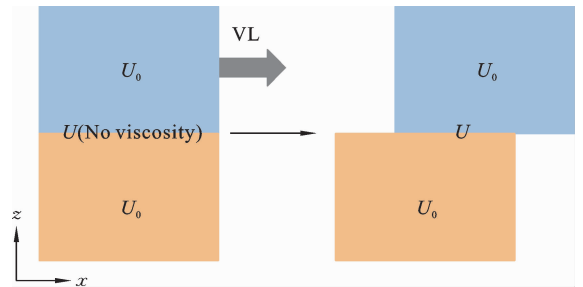


图 5 速度加载计算无粘性模型受力示意图

Fig. 5 Schematic diagram of calculating force acting on a velocity loading, non-viscous model

向运动, 只允许块体在  $x$  方向运动; 通过恒定速度加载, 让块体向  $x$  轴正方向滑动. 由于块体在  $z$  方向上被严格限制, 不允许发生任何运动, 这相当于将势能面嵌入到势能阱的最深处, 由于界面无黏附力, 块体受到的摩擦力完全由法向接触刚度贡献, 此时也就达到了势能面抵抗错动阻力的极值.

上图是无粘模型块体与基底不同间距时(间距

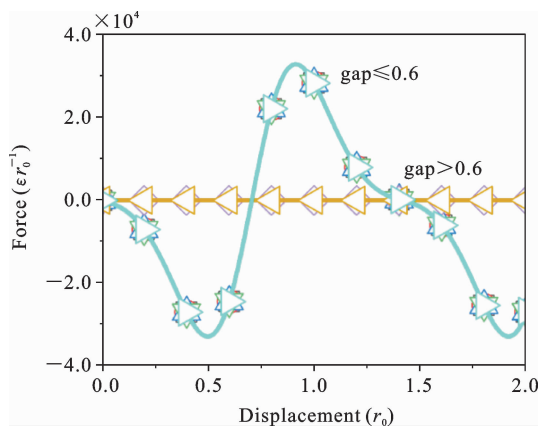


图 6 块体与基底不同间距时的块体所受摩擦力  
Fig. 6 The frictional force acting on the block when the distance between the block and the substrate is different

分别为 0.01、0.1、0.3、0.5、0.6、0.8、1) 摩擦力随块体滑动位移变化情况。首先,对于间距大于 0.6 的模型,块体所受摩擦力一直是 0,这是因为模拟中取消了界面粘性,间距大于 0.6 时块体与基底之间没有吸引力,此时势能面几乎不被压缩,块体滑动不会受到任何阻力。其次,对于间距小于 0.6 的模型,块体所受摩擦力完全一致,并表现出周期性(周期为  $\sqrt{2}$ ),这是因为约束了块体  $z$  方向运动,只要势能面开始嵌入,滑动后就会嵌入到势阱最深处,与初始间

距无关。又由于块体与基底材料晶格常数  $a=\sqrt{2}$ ,则势能面周期也为  $\sqrt{2}$ ,这正是摩擦力的周期。此时摩擦力数值非常大,这说明本文模型所加法向载荷远没有将势能面充分压缩,再次说明假设  $\gamma$  为常数并忽略势能面形状改变的影响是合理的。还要注意,尽管改变  $U$  相当于同时改变了法向接触刚度与粘性,但由于在  $U$  比较大时势能面压缩程度非常轻微(因为我们施加的恒定法向外载一直在弹性范围内,相对来说很小),平衡距离  $h$  改变也微乎其微,因此法向接触刚度即使变化也不造成势能面压缩情况显著变化。所以尽管法向接触刚度也在变化,但认为粘性主导了  $U$  比较大时的界面摩擦依然是合理的。

模拟结果揭示法向力的变化会影响静摩擦系数,这与 Fineberg 等<sup>[21]</sup>的宏观实验结果是一致的,对于原子级光滑界面的摩擦,晶体界面非公度接触时可能会出现结构超滑现象<sup>[36]</sup>,我们的模拟并不涉及此方面。

### 3 模型滑动方向的长度对摩擦的影响

本小节通过选取不同界面势能,调控界面长度,观察到极限静摩擦力的饱和现象。如图 7 所示,给出了不同界面势能下不同长度模型的极限静摩擦力与静摩擦系数变化规律。

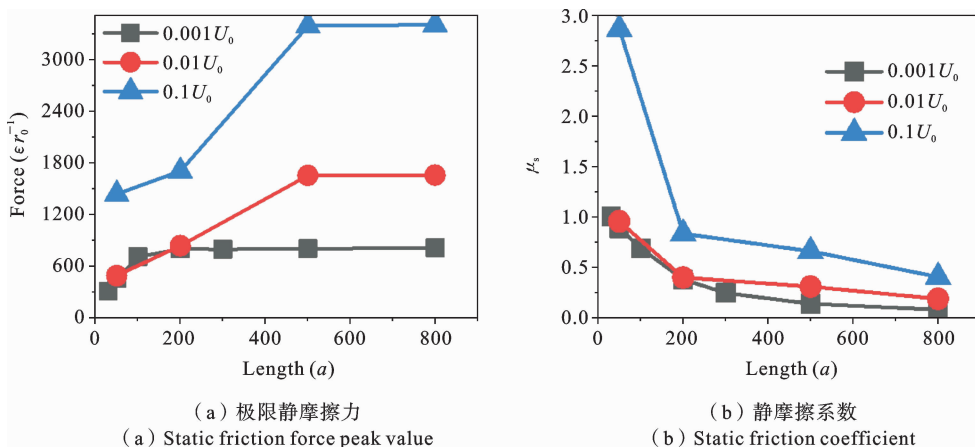


图 7 不同界面势能模型改变  $x$  方向长度的模拟结果

Fig. 7 Simulation results of different interface potential energy models changing model length

图 7(a)是极限静摩擦力  $F_{f-static}$  的变化,对三种界面势能,  $F_{f-static}$  随着  $L$  的增加首先会增加,  $L$  增加

到一定程度(转变长度  $L_c$ )后  $F_{f-static}$  饱和,不再随  $L$  增加而变化。其中  $0.001U_0$  模型的转变长度  $L_c$  在

200a 附近, 0.01U<sub>0</sub> 与 0.1U<sub>0</sub> 转变长度在 500a 附近, 说明 U 较小时 L<sub>c</sub> 随着 U 增加而增加, 当 U 足够大时 L<sub>c</sub> 不再变化. 图 7(b) 是静摩擦系数 μ<sub>s</sub> 的变化. 模拟中保持法向压强 σ<sub>zz</sub> 不变, 因此法向力 F<sub>N</sub> 随 L

线性增加, 由于 F<sub>f-static</sub> 增加幅度远不如 F<sub>N</sub> 增加幅度, 因此 μ<sub>s</sub> 随 L 增加不断减小. 通过对接触层进行详细分析, 我们认为极限静摩擦力随接触长度饱和是界面摩擦动力学过程随接触长度的变化导致的.

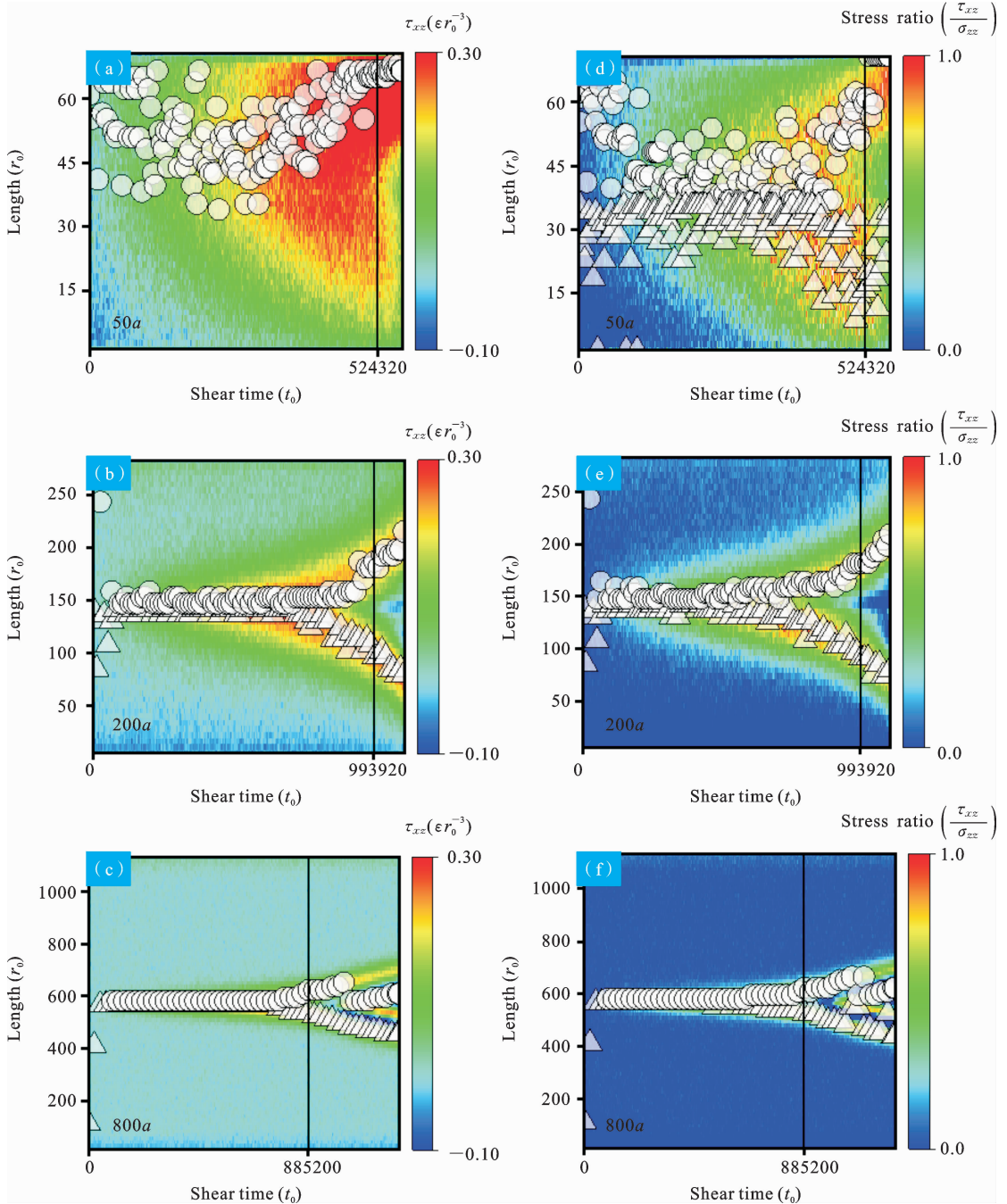


图 8 U 为 0.001U<sub>0</sub>、L 分别为 50a、200a、800a 模型的接触层云图, 横轴代表模拟时间, 纵轴代表模型长度, 色温越高代表数值越大. 黑色实线标记达到静摩擦极限 F<sub>f-static</sub> 的时刻. 圆圈标记或三角标记代表该时刻的接触层上的极值(圆圈标记对应 x 轴正方向传播, 三角标记对应 x 轴负方向传播). (a)-(c) 切应力云图; (d)-(f) 应力比云图

Fig. 8 Contact layer cloud maps for models with U of 0.001 U<sub>0</sub>, and L of 50a, 200a, and 800a, respectively. (a)-(c) Shear stress cloud maps; (d)-(f) Stress ratio cloud maps

图 8 展示了不同长度模型接触层切向应力与应力比云图,说明原子级光滑界面的静动摩擦转变是一个“局部形核-扩展”过程.图 8(a)-(c)是接触层切应力  $\tau_{xz}$  云图,对于  $L$  较小的模型( $L < 50a$ ),切应力的极值分布很分散,界面上大部分区域切应力都会增加,大部分界面都是局部滑动形核的区域.对于  $L$  较大的模型( $L \geq 200a$ ), $\tau_{xz}$  极值只分布在模型中部,即加载区域附近,形成一个切应力局部集中的“核”.在局部没有达到静摩擦极限时,应力集中使切应力极值分布在加载区域(中部).在充分形核后,局部切应力不断增加,接触层中部率先达到局部极值,发生局部滑动,切应力极值分布区域开始向  $x$  轴正负方向扩展.图 8(d)-(f)是接触层切应力与法向应力的应力比( $\tau_{xz}/\sigma_{zz}$ )云图,应力比极值分布同样先集中在加载区域,在形核充分后向两端传播,应力比形式上与静摩擦系数非常相似,我们可以认为局部滑动前一刻的应力比极值就是局部摩擦系数(注意到每一时刻接触层上都存在应力比极值,但并非每个时刻都可以视为静摩擦系数).

以上“局部形核-扩展”过程是准静态的,切应力极值传播速度和应力比极值传播速度都非常慢.图 9 是  $U$  为  $0.001U_0$ .模型切应力极值传播速度与应力比极值传播速度随长度变化的结果.这些速度都在  $10^{-4}$  量级,而体材料的纵波波速  $v_L$  为:

$$v_L = \sqrt{\frac{E}{\rho}} = 10.33 \frac{r_0}{t_0} \quad (5)$$

对比不同  $L$  结果,在准静态切向加载条件下, $L$  较小时界面没有足够区域让局部滑动的核传播,在形核不充分时就发生了整体滑动. $L$  增加时,界面局部滑动的核传播的区域不断增加,形核越来越充分,摩擦力也随之增加.在  $L$  增加到足够大时,形核足够充分,局部形核区域的摩擦力提供了绝大部分界面摩擦力,此时  $L$  继续增加极限静摩擦力不会增加,发生饱和.对于极限静摩擦力饱和现象,Pugno 等<sup>[26]</sup>模拟了石墨烯薄片在石墨烯基底上滑动,也得出了薄片长度增长摩擦力会先增加再饱和的结论,但这个解只适用于薄片.他们预测摩擦力饱和和长度  $L_c$  的公式中包含界面剪切强度  $G$ ,认为  $G$  越大  $L_c$  会越小.剪切强度  $G$  与界面强度  $U$  成正比,本研究工作表明  $L_c$  会随着  $G$  增加而增加,但不会一直增加,这是模型维度增加所导致的.

Hurtado 等<sup>[37]</sup>讨论了单个 asperity 的摩擦,也提出了摩擦应力与接触尺寸相关.他们认为接触边缘的应力集中会导致摩擦滑移的不稳定性,这意味着界面局部会产生位错,从而导致摩擦应力与接触尺寸的依赖性.在本文的模拟中通过倒圆角规避块体边缘应力集中现象,同时载荷水平比较低,块体变形始终在弹性范围内,因此模拟结果显示的尺寸效应完全是基于界面摩擦动力学的,材料内部不产生位错.同时本文模拟的是三维块体的摩擦,更侧重接触面整体情况的考量,而 Hurtado 等讨论的是单个 asperity 的摩擦,相当于考察一个局部接触.因此几何上的差异与考察角度的不同也是模型结果不同的主要原因.

另外,Fineberg 等<sup>[2]</sup>的宏观实验中所得到的锋面传播速度要快的多,在低界面强度以及无粘性的一些模拟结果中,我们同样观察到了与材料波速相当的传播现象,粘性可能对局部滑动锋面传播速度有重要影响.

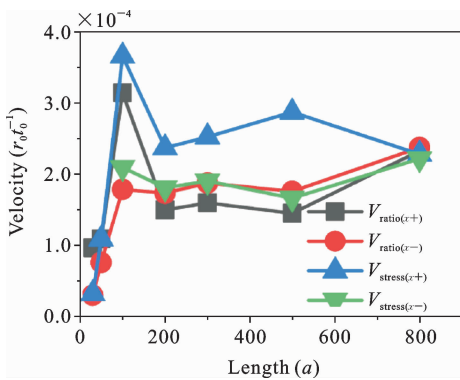


图 9  $U$  为  $0.001U_0$ .模型的接触层切应力极值与应力比极值传播速度. $x+$ ( $-$ )代表  $x$  轴正向(负向)

Fig. 9 The shear stress peak and stress ratio peak propagation speed of the contact layer in the model with  $U = 0.001U_0$ .  $x+$ ( $-$ ) represents the positive (negative) direction of  $x$  axis

### 4 结论

综上所述,我们基于可调控的修正 Morse 势函数,使用分子动力学方法模拟了原子级光滑界面的

静动摩擦转变过程. 主要结论有:

(1) 原子级光滑界面的摩擦力来源为法向接触刚度的贡献与界面粘性的贡献. 在法向外载恒定时, 刚度与粘性的竞争会让静摩擦系数  $\mu_s$  随界面强度  $U$  非线性变化. 当  $U$  较小时, 界面接触刚度会主导摩擦行为,  $\mu_s$  会随  $U$  增加而减小, 粘性影响微弱; 当  $U$  较大时, 界面粘性会主导摩擦行为,  $\mu_s$  会随  $U$  增加而增加, 接触刚度影响微弱.

(2) 对原子级光滑接触界面, 极限静摩擦力不会随着滑动方向上接触尺寸增加而无限增加, 会在接触长度足够长时发生饱和, 这是因为接触长度足够长时有充足区域让局部区域“形核”然后传播.

### 参考文献

- [1] 李群仰, 张帅, 祁一洲, 姚泉舟, 黄月华. 二维材料纳米尺度摩擦行为及其机制[J]. 固体力学学报, 2017, 38(03): 189-214. (Li Q Y, Zhang S, Qi Y Z, Yao Q Z, Huang Y H. Friction of two dimensional materials at the nanoscale behavior and mechanisms [J]. Chinese Journal of Solid Mechanics, 2017, 38 (03): 189-214. (in Chinese))
- [2] Bowden, F P, Tabor D. The Friction and Lubrication of Solids [M]. online ed. Oxford, 2001: 5-32.
- [3] Rubinstein S M, Cohen G, Fineberg J. Detachment fronts and the onset of dynamic friction [J]. Nature, 2004, 430(7003): 1005-9.
- [4] Bayart E, Svetlizky I, Fineberg J. Fracture mechanics determine the lengths of interface ruptures that mediate frictional motion [J]. Nature Physics, 2016, 12: 166-170.
- [5] Svetlizky I, Kammer D S, Bayart E, Cohen G, Fineberg J. Brittle fracture theory predicts the equation of motion of frictional rupture fronts [J]. Physical Review Letters, 2017, 118: 125501.
- [6] Gvirtzman S, Fineberg J. Nucleation fronts ignite the interface rupture that initiates frictional motion [J]. Nature Physics, 2021, 17: 1037-1042.
- [7] Rubinstein S M, Shay M, Cohen G, Fineberg J. Crack-like processes governing the onset of frictional slip [J]. International Journal of Fracture, 2006, 140: 201-212.
- [8] Braun O M, Barel I, Urbakh M. Dynamics of transition from static to kinetic friction [J]. Physical Review Letters, 2009, 103(19): 194301.
- [9] Maegawa S, Suzuki A, Nakano K. Precursors of global slip in a longitudinal line contact under non-uniform normal loading [J]. Tribology Letters, 2010, 38: 313-323.
- [10] Trømborg J, Scheibert J, Amundsen D S, Thøgersen K, Malthe-Sørenssen A. Transition from static to kinetic friction-insights from a 2D model [J]. Physical Review Letters, 2011, 107: 074301.
- [11] Katano Y, Nakano K, Otsuki M, Matsukawa H. Novel friction law for the static friction force based on local precursor slipping [J]. Scientific Reports 4, 2014: 6324.
- [12] Trømborg J K, Sveinsson H A, Scheibert J, Thøgersen K, Amundsen D S, Malthe-Sørenssen A. Slow slip and the transition from fast to slow fronts in the rupture of frictional interfaces [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences, 2014, 111: 8764-8769.
- [13] Bar-Sinai Y, Spatschek R, Brener E A, Bouchbinder E. Instabilities at frictional interfaces: Creep patches, nucleation, and rupture fronts [J]. Physical Review E, 2013, 88: 060403.
- [14] Bonfanti S, Taloni A, Negri C, et al. Atomic-scale front propagation at the onset of frictional sliding [J]. Journal of Physical Chemistry Letters, 2017, 5438-5443.
- [15] Barras F, Aghababaei R, Molinari J F. Onset of sliding across scales: How the contact topography impacts frictional strength [J]. Physical Review Letters, 2021, 5: 023605.
- [16] Mo Y, Turner K T, Szułufarska I. Friction laws at the nanoscale [J]. Nature, 2009, 457(7233): 1116-1119.
- [17] Li Q, Tullis T E, Goldsby D, Carpick R W. Frictional ageing from interfacial bonding and the origins of rate and state friction [J]. Nature, 2011, 480: 233-236.
- [18] Li Q, Dong Y, Perez D, Martini A, Carpick R W. Speed dependence of atomic stick-slip friction in optimally matched experiments and molecular dynamics simulations [J]. Physical Review Letters, 2011,

- 106; 126101.
- [19] Li S, Zhang S, Chen Z, Feng X-Q, Li Q. Length scale effect in frictional aging of silica contacts [J]. *Physical Review Letters*, 2020, 125: 215502.
- [20] Gao J, Luedtke W D, Gourdon D, Ruths M, Israealachvili J N, Landman U. Frictional forces and Amontons' law: From the molecular to the macroscopic scale [J]. *Journal of Physical Chemistry B*, 2004, 108(11): 3410-3425.
- [21] Ben-David O, Fineberg J. Static friction coefficient is not a material constant [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 106: 254301.
- [22] Otsuki M, Matsukawa H. Systematic breakdown of Amontons' law of friction for an elastic object locally obeying Amontons' law [J]. *Scientific Reports* 3, 2013: 1586.
- [23] Iwashita W, Matsukawa H, Otsuki M. Static friction coefficient depends on the external pressure and block shape due to precursor slip [J]. *Scientific Reports* 13, 2023: 2511.
- [24] Luan B, Robbins M O. Contact of single asperities with varying adhesion: comparing continuum mechanics to atomistic simulations [J]. *Physical Review E*, 2006, 74: 026111.
- [25] Hu J, Song H, Sandfeld S, et al. Multiscale study of the dynamic friction coefficient due to asperity plowing [J]. *Friction*, 2021, 9: 822-839.
- [26] Zhang X, Dong Y, Meng Y, Wen S. Investigation on adhesion work and its effects on micro friction [J]. *Key Engineering Materials*, 2006, 315-316: 784-787.
- [27] Deng Z, Smolyanitsky A, Li Q, Feng X Q, Cannara R J. Adhesion-dependent negative friction coefficient on chemically modified graphite at the nanoscale [J]. *Nature Mater*, 2012, 11: 1032-1037.
- [28] Pugno N M, Yin Q, Shi X, Capozza R. A generalization of the Coulomb's friction law: from graphene to macroscale [J]. *Meccanica*, 2013, 48: 1845-1851.
- [29] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [30] Rajan V P, Warner D H, Curtin W A. An interatomic pair potential with tunable intrinsic ductility [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, 24: 025005
- [31] Hu J, Song H, Stefan S, Liu X, Wei Y. Breakdown of Archard law due to transition of wear mechanism from plasticity to fracture [J]. *Tribology International*, 2022, 173: 107660.
- [32] Hu J, Zeng Q. Friction and wear in nanoscratching of single crystals: effect of adhesion and plasticity [J]. *Nanomaterials*, 2022, 12: 4191.
- [33] Hu J, Liu X, Wei Y. Head-on impact of metal microparticles: aggregation or separation? [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2023, 171: 104388.
- [34] Hu J, Liu X, Wei Y. Effect of plasticity and adhesion on the stick-slip transition at nanoscale friction [J]. *Tribology International*, 2021, 164: 107230.
- [35] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic Simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 18(1): 015012.
- [36] Hod O, Meyer E, Zheng Q, Urbakh M. Structural superlubricity and ultralow friction across the length scales [J]. *Nature*, 2018, 563: 485-49
- [37] Hurtado J A. , Kim K S. Scale effects in friction of single-asperity contacts. I. From concurrent slip to single-dislocation-assisted slip [J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*. 1999, 4553363-3384.

## Research on the Mechanism of Transition from Static to Dynamic Microscale Friction Behavior

Xin Wu<sup>1,2</sup> Jianqiao Hu<sup>1</sup> Xiaoming Liu<sup>1,2</sup>

(<sup>1</sup>State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190)

(<sup>2</sup>School of Engineering Science, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100049)

**Abstract** Microscale contact and friction behavior are widely present in various important industrial devices and systems. As electromechanical systems become more integrated and miniaturized, the impact of friction on devices becomes increasingly important. At the microscale, friction behavior exhibits a strong dependence on interfacial viscosity and contact size. By developing a series of modifiable potential functions to quantitatively regulate interfacial properties, friction on atomically smooth interfaces with different properties is fully simulated using molecular dynamics methods. The study first examined the influence of various interfacial potential energies on the static friction coefficient, revealing a nonlinear relationship between the static friction coefficient and interfacial potential energy intensity. Furthermore, it was found that this nonlinearity is attributed to the competition between interfacial viscosity and contact stiffness. Additionally, the study investigated the influence of contact size on static friction coefficient. The simulation results showed that as the tangential contact length of the interface increases, the peak static friction force first increases and then stabilizes. By analyzing the contact layer cloud maps obtained through post-processing, interfacial friction is observed as a “nucleation-propagation” process, influenced by different contact sizes which affect the dynamic process and lead to changes in the peak static friction force. This study provides new insights into the effects of interfacial potential energy and contact size on microscale friction through molecular dynamics simulations, it is feasible to regulate friction by changing interfacial potential energy, but attention should be paid to the nonlinear changes in the friction coefficient. Besides, solely increasing the contact size cannot infinitely increase the peak static friction force.

**Key words** friction, atomically smooth surface, molecular dynamics, interfacial potential energy, model length