

УДК 621.891:539.621

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТВЕРДЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ В ПРИСУТСТВИИ АНИЗОТРОПНОГО СМАЗОЧНОГО СЛОЯ*

А. А. СУСЛОВ[†], С. А. ЧИЖИК, С. Ф. ЕРМАКОВ, О. Ю. КОМКОВ

Институт механики металлополимерных систем им. В. А. Белого НАНБ, ул. Кирова 32а, 246050 г. Гомель, Беларусь.

С использованием компьютерного моделирования анализируется распределение контактных давлений в шероховатом слое, покрытом граничной жидкокристаллической смазочной пленкой. Установлено, что жидкие кристаллы способствуют более равномерному распределению по участку шероховатой поверхности контактных давлений в сравнении с моделью, в которой жидкокристаллический слой отсутствует. Показано, что при наличии на поверхности анизотропного смазочного слоя нагрузочный диапазон сопряжения может быть увеличен в 4,4 раза.

Введение. Упорядоченная структура граничной смазочной пленки играет большую роль в снижении потерь при трении твердых поверхностей. Именно поэтому данной проблеме уделялось внимание со стороны многих исследователей [1–3]. Экспериментально установлено, что при структурирующем воздействии твердой поверхности в граничном слое смазочного материала формируется молекулярный порядок, сходный с жидкокристаллическим (мезогенным).

Использование для смазывания непосредственно жидких кристаллов (индивидуально и в качестве присадок) позволяет повысить степень упорядоченности граничной смазочной пленки [3]. В конечном итоге это отражается на значительном снижении трения и износа трибосопряжения, а также на расширении его нагрузочного диапазона [4–7]. Очевидно, что уникальные смазочные характеристики жидких кристаллов (ЖК) определяются их специфической молекулярной структурой. Ее основной особенностью является послойное упорядочение, при котором в пределах одного слоя (соответственно, для одного слоя относительно другого) наблюдается легкое течение, а приложение нормальных сжимающих или растягивающих усилий не вызывает взаимного проникновения слоев. Иными словами, жидкокристаллическая структура характеризуется низким сопротивлением сдвигу и упругой реакцией на нормально приложенное давление [3, 6].

В основе механизма смазочного действия ЖК и жидкокристаллических присадок лежит их спо-

собность адсорбироваться на поверхностях в процессе динамического контакта [7, 8]. При этом накапливающийся во впадинах микрорельефа жидкокристаллический слой благодаря своим свойствам воспринимает часть контактной нагрузки, предохраняя поверхности от непосредственного контакта, и локализует сдвиг в объеме смазочной пленки.

Весьма важно, что жидкие кристаллы химически не взаимодействуют с твердой поверхностью, что характерно, например, для поверхностно-активных веществ, и, следовательно, не способствуют ее разрушению. В этом плане ЖК сходны с твердосмазочными материалами, также обладающими слоистой молекулярной структурой [7, 9]. Тем не менее, жидкие кристаллы в отличие от твердосмазочных дисперсий образуют с углеводородными маслами истинные растворы [6]. Таким образом, жидкие кристаллы в трибологии можно рассматривать как материалы промежуточные между поверхностно-активными веществами и твердыми смазками (их дисперсиями), проявляя такие их особенности, как растворимость в маслах и адсорбция на твердой поверхности, с одной стороны, и слоистое упорядочение граничной смазочной пленки, обладающей упругой реакцией на нормально приложенное давление, с другой. Как показывают исследования, ЖК обладают, соответственно, и промежуточными триботехническими характеристиками [9].

Благодаря анизотропии физических свойств, ЖК при приложении нормальных нагрузок, в от-

[†] Автор, с которым следует вести переписку.

* Работы выполнялись при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

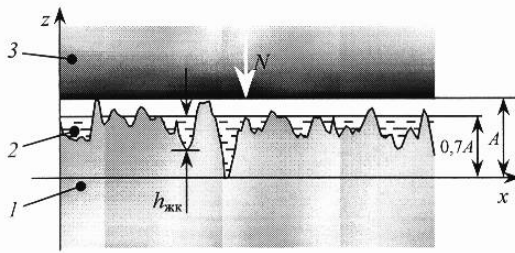


Рис. 1. Схема контакта «шероховатая поверхность – плоскость»: 1 – исходный рельеф шероховатой поверхности, полученный с помощью АСМ; 2 – слой смазочного материала, заполняющий впадины микрорельефа шероховатой поверхности; 3 – плоскость, с помощью которой моделируется приложение нагрузки N

личие от обычных жидкостей, не растекаются и способны, соответственно, выдерживать давления, в 10^4 раз превышающие значения, характерные для изотропных сред [4, 6]. В случае граничной смазочной пленки, покрывающей реальную поверхность с конкретной шероховатостью, это означает, что жидкие кристаллы во впадинах микрорельефа воспринимают часть контактной нагрузки, перераспределяя давление на участки твердой поверхности, не образуя фактическую площадь контакта.

В настоящей работе делается попытка смоделировать описанную ситуацию с помощью компьютерных методик с целью оценить вклад граничного смазочного слоя с жидкокристаллическими свойствами в перераспределение по участку поверхности контактного давления.

Методика эксперимента и оборудование.

При моделировании контактного взаимодействия использовалась схема «шероховатая поверхность – плоскость» (рис. 1). В качестве модели шероховатого контртела использовался реальный образ участка поверхности полированной стали, полученный методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) [10] и представляющий собой матрицу данных о высоте микрорельефа в точках сканирования (рис. 2а). Плоскость, с помощью которой

моделировалось приложение нагрузки N , считалась абсолютно жесткой и недеформируемой. При моделировании принималось, что деформируется только шероховатый слой, деформация является упругой и пропорциональна прикладываемой нагрузке (модель винклеровского слоя). Моделирование выполнялось с помощью комплекта компьютерных программ SurfaceSoft, разработанного в секторе зондового анализа поверхности ИММС НАНБ.

На первом этапе работы моделировалось заполнение впадин микрорельефа участка поверхности стали смазочным материалом. Уровень «заполнения» составлял $0,7A$ (рис. 1), т.е. для участка, изображенного на рис. 2б, соответствовал высоте $23,7$ нм от нижней точки шероховатого слоя (рис. 2в). Согласно проведенным расчетам, в пределах $0-0,7A$ находится 95% материала шероховатого слоя данного образца. Предполагалось также, что высокие давления на пятна фактического контакта вытесняют жидкие кристаллы с последних, и взаимодействие здесь осуществляется непосредственно между твердыми поверхностями. Кроме того, как показано в работе [7], слой ЖК подобной толщины может адсорбироваться из смазочной среды на трущихся поверхностях.

На начальном этапе контакт двух поверхностей происходит без вклада со стороны смазочного слоя. По достижении модельной плоскостью в процессе деформации шероховатого слоя уровня $0,7A$, т.е. смазочного материала предполагалось, что приложение нормальной нагрузки вызывает в нем упругую реакцию, аналогичную реакции твердого тела (в отличие от обычной жидкости, которая при подобном воздействии вытесняется в области с меньшим давлением).

Таким образом, часть прикладываемой со стороны модельной плоскости нагрузки воспринимают через смазочный слой с жидкокристаллическими свойствами участки шероховатой поверхности, не находящиеся с ней в непосредственном контакте. Однако свойства материала поверхности (стали) и смазочного материала (жидкого кристалла), в частности, их модули упруго-

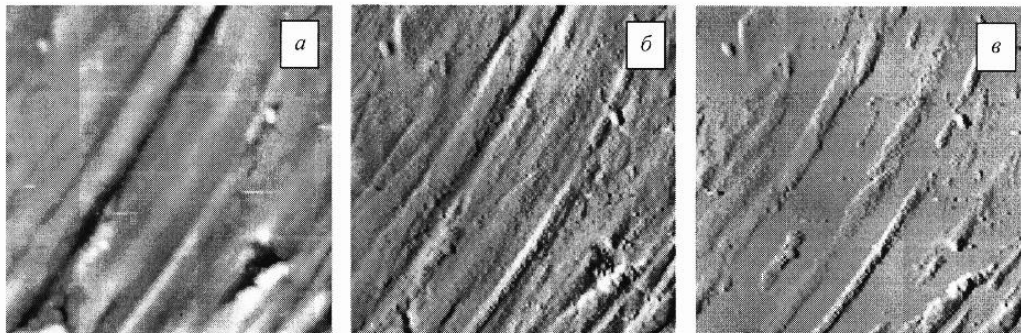


Рис. 2. Участок поверхности стали: а – высотное представление (карта высот); б – угловое представление (симуляция освещения); в – моделирование заполнения на $0,7A = 23,7$ нм смазочным материалом. Поле сканирования $5,2 \times 5,2$ мкм, $R_a = 33,8$ нм, $R_q = 3,1$ нм, $R_z = 18,5$ нм

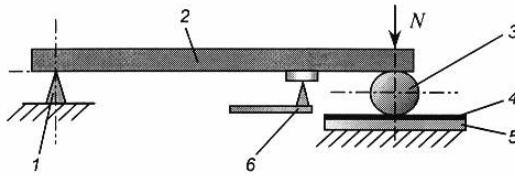


Рис. 3. Схема устройства для индентирования: 1 – опора; 2 – измерительная балка; 3 – шаровой индентор ($r = 14,3$ мм); 4 – исследуемый материал (образец); 5 – подложка или жесткое основание; 6 – зонд АСМ для детектирования вертикального перемещения измерительной балки; N – нагрузка

сти различны. Поэтому для расчета реакции со стороны шероховатой поверхности в каждой точке описывающей ее матрицы данных определялся эквивалентный модуль упругости, зависящий от толщины смазочного слоя $h_{жк}$:

$$E_3 = E_{жк} E_{ст} / [E_{жк}(1 - h_{жк}/A) + E_{ст} h_{жк}/A] \quad (1)$$

Модуль упругости стали принимался $E_{ст} = 2 \cdot 10^{11}$ Па. Для определения модуля упругости жидкого кристалла $E_{жк}$ проводился дополнительный эксперимент.

С учетом того, что свойства граничных слоев смазочных материалов существенно отличаются от их объемных свойств [1, 3], а также что граничная жидкокристаллическая пленка характеризуется упругой реакцией на нормально приложенное давление, т.е. фактически проявляет свойства кристаллов [4, 6, 11], было предложено оценить в первом приближении порядок модуля упругости для граничной пленки ЖК, измерив объемный модуль упругости жидкого кристалла в твердой фазе.

С этой целью было разработано устройство для наноиндентирования, позволяющее определять вязкоупругие характеристики высокоэластичных материалов (рис. 3). Аппаратная реализация данного устройства основывается на измерении с нанометровой точностью внедрения микроскопического индентора (например, шарового)

в образец исследуемого материала под заданной нагрузкой.

Регистрация наноперемещений макроскопического индентора позволяет прикладывать к образцу минимальные давления, не превышающие предела текучести исследуемых материалов и исследовать механические свойства в тонких поверхностных слоях. Измерение глубины индентирования с нанометровой точностью достигается применением в описываемом устройстве высокочувствительного зонда атомно-силового микроскопа с соответствующей системой регистрации перемещений.

Калибровка датчика перемещений производится по традиционной для сканирующих зондовых микроскопов схеме. Система нагружения реализована на базе электромагнита и калибруется по схеме компенсации весовой нагрузки. Нагружение и сбор данных в устройстве осуществляются автоматизированно с управляющего компьютера. При этом могут быть реализованы две схемы нагружения образцов – статическая и динамическая (рис. 4). В первом случае цикл нагружения–разгрузки осуществляется однократно, а по достижении заданной величины нагрузка выдерживается на постоянном уровне в течение некоторого времени (рис. 4а). Во втором случае нагрузка увеличивается постепенно до максимума с последующим быстрым сбросом и повторением такого цикла заданное количество раз (рис. 4б).

Для измерений на стеклянную подложку равномерным слоем наносился расплавленный мезоген – холестерилпальмитат, который затем охлаждался до получения однородной монокристаллической твердой пленки толщиной ≈ 1 мкм. Индентирование образцов производилось в статическом режиме при нагрузках 0,04–0,09 Н и динамическом режиме при 0,01–0,09 Н с шагом 0,01 Н. Пример диаграмм, полученных при индентировании образца жидкого кристалла в твердой фазе, представлен на рис. 4.

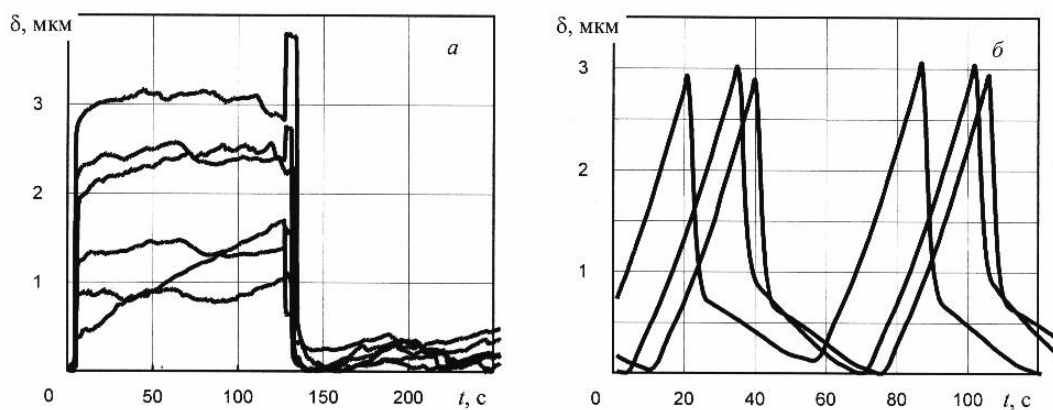


Рис. 4. Диаграммы нагружения образцов при индентировании: а – статический режим ($N = 0,04 \dots 0,09$ Н); б – динамический режим ($N = 0,07$ Н)

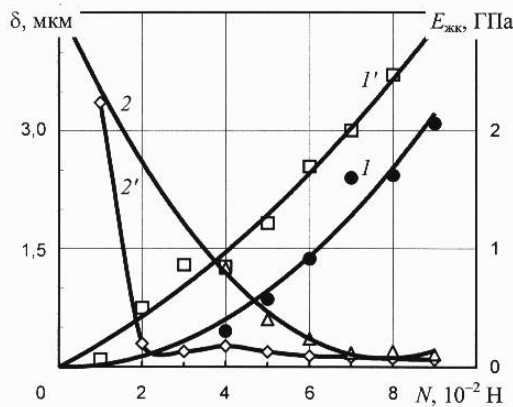


Рис. 5. Зависимость глубины индентирования образца ЖК в твердой фазе (I, I') и модуля упругости ($2, 2'$) от нагрузки при статическом ($I, 2$) и динамическом ($I', 2'$) режимах нагружения

Взаимодействие индентора с образцами в пределах прикладываемых нагрузок носило упругий характер. В этой связи модуль упругости материала рассчитывался на основании усредненных данных о глубине индентирования при данной нагрузке по известной формуле Герца

$$E_{\text{жк}} = \frac{3}{4} \frac{N}{r^{1/2} \delta^{3/2}}. \quad (2)$$

Результаты эксперимента и обсуждение.

На рис. 5 приведены результаты измерений и расчета согласно уравнению (2) модуля упругости жидкого кристалла.

Как видно из рис. 5, наиболее стабильные значения модуля упругости порядка 0,1 ГПа фиксируются при глубине индентирования $\delta > 2$ мкм как в статическом, так и динамическом режиме при нагрузках $N \geq 0,07$ Н. При этом на кривых динамического нагружения образцов при глубине индентирования $\delta > 2$ мкм и нагрузке, соответственно, $N > 0,05$ Н становятся различимы признаки упругого восстановления. Отметим также, что модуль упругости жидкого кристалла в мезофазе согласно работ [3, 4, 6] оценивается $E_{\text{жк}} \approx 1 \dots 10$ МПа, что на порядок ниже полученных для кристаллической фазы значений.

Повышенные значения модуля упругости $E_{\text{жк}}$ при малых глубинах внедрения индентора (в частности, при динамическом нагружении) можно объяснить действием поверхностных сил, а также масштабными факторами [12]. Следует отметить, что именно область малых внедрений (порядка 10–50 нм) дает информацию об упругих характеристиках адсорбированного приповерхностного слоя жидкого кристалла.

Исходя из результатов, полученных при динамическом нагружении образцов твердой фазы жидкого кристалла, при внедрении $\delta \approx 90$ нм (рис.

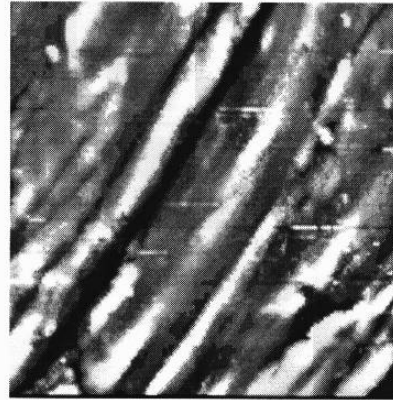


Рис. 6. Карта эквивалентного модуля упругости для участка поверхности, покрытого жидкокристаллическим слоем

5 кривая I') величина модуля упругости составляет $E_{\text{жк}} \approx 2,24$ ГПа (рис. 5 кривая $2'$). Аппроксимация полученных при статическом режиме нагружения зависимостей $\delta = f(N)$ (рис. 5 кривая I) и $E = f(N)$ (рис. 5 кривая 2) с помощью полиномов 2-ой степени и экстраполяция их в область нагрузок $0 < N < 0,04$ Н показывает, что при внедрении порядка 10 нм (т.е. соизмеримом с толщиной слоя жидкого кристалла, адсорбированного из смазочной среды на твердой поверхности в условиях динамического контакта, см. гл. 4) модуль упругости составляет $E \approx 2,35$ ГПа. Заметим также, что величина $E_{\text{жк}}$, определенная экспериментально при динамическом нагружении и рассчитанная для статического режима при $N < 0,01$ Н, практически совпадает.

Тем не менее полученные данные относятся в большей степени к рассматриваемому материалу в объеме. Поэтому учитывая отмеченную выше тенденцию, а также то, что в граничных условиях адсорбированная пленка испытывает значительное структурирующее воздействие со стороны твердой поверхности, для дальнейших расчетов модели контакта значение модуля упругости жидкого кристалла принималось $E_{\text{жк}} = 20$ ГПа.

С использованием выражения (1) для моделирования распределения контактных давлений в шероховатом слое предварительно была рассчитана карта эквивалентного модуля упругости участка поверхности, покрытого жидкокристаллическим слоем (рис. 6).

Результаты моделирования представлены в виде карты распределения контактных давлений (рис. 7а). Сравнивая ее с подобной картой, рассчитанной без учета анизотропных свойств граничного смазочного слоя (рис. 7б), отметим, что присутствие на поверхности ЖК способствует более равномерному распределению контактного давления по участку поверхности. Давление на выступы микрорельефа снижается за счет перераспределения части прикладываемой нагрузки на бо-

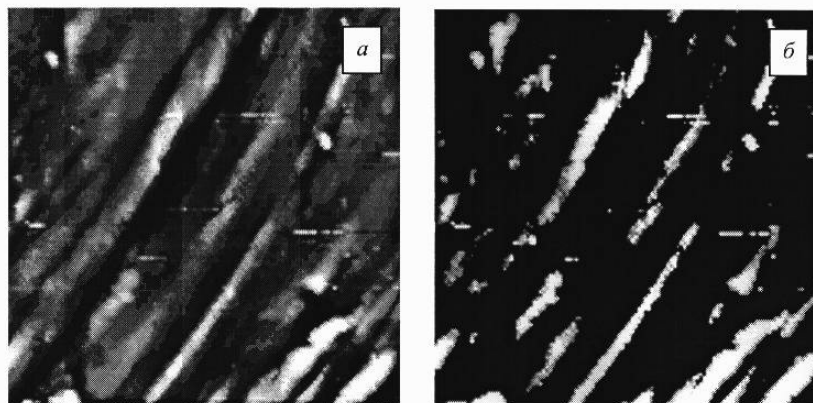


Рис. 7. Карта распределения по участку шероховатой поверхности контактных нагрузок при достижении модельной плоскостью слоя смазочного материала: *а* – обладающего мезогенными свойствами; *б* – не обладающего мезогенными свойствами

лее низкие области шероховатого слоя. В то же время при отсутствии смазочного слоя с жидкокристаллическими свойствами давление локализуется только на выступах микрорельефа, сумма площадей которых и составляет фактическую площадь контакта (ФПК) (рис. 7б).

Таким образом, наличие на поверхности граничного слоя жидких кристаллов создает эффект увеличения ее ФПК за счет перераспределения части контактной нагрузки на более низкие области микрорельефа. С другой стороны, наблюдается снижение давления на выступах (менее светлые области карты контактных давлений, соответствующие выступам микрорельефа), что можно интерпретировать также как возможность повышения нагрузки на сопряжение или увеличение его нагрузочного диапазона.

Анализ опорных кривых (рис. 8) для карт

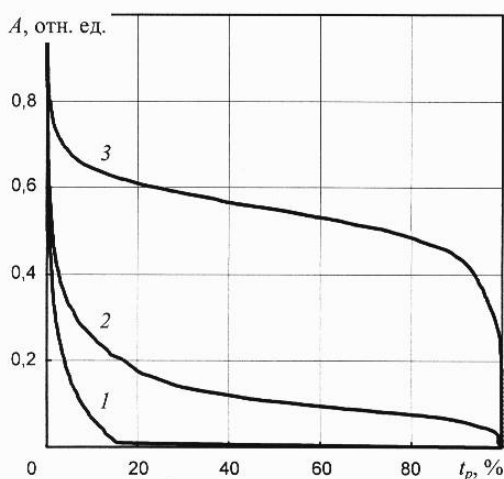


Рис. 8. Опорные кривые карт распределения контактных давлений для шероховатой поверхности: 1 – с немезогенным слоем смазки; 2 – с жидкокристаллическим слоем; 3 – исходный рельеф

распределения контактных давлений (рис. 7) подтверждает сделанные на основании визуальных оценок выводы. Так, расчеты показывают, что площадь под кривой 1 (0,032 ед.) в 4,4 раза меньше данного параметра для кривой 2 (0,141 ед.). Полученный результат можно интерпретировать как соответствующее повышение нагрузочной способности сопряжения при наличии на поверхности граничного жидкокристаллического смазочного слоя.

Выводы. С помощью разработанного устройства проведена экспериментальная оценка модуля упругости жидкого кристалла в твердой фазе. Данный параметр, характеризующий в первом приближении модуль упругости граничного адсорбированного жидкокристаллического слоя, был использован при моделировании контакта шероховатой поверхности, покрытой слоем мезогенного смазочного материала, и плоскости. Установлено, что присутствие на шероховатой поверхности жидких кристаллов способствует более равномерному распределению контактных давлений в сравнении с моделью, в которой мезогенный слой отсутствует. Анализ данных показал, что при наличии на поверхности граничного жидкокристаллического смазочного слоя нагрузочный диапазон сопряжения может быть увеличен в $\approx 4,4$ раза. Предложенная методика может также быть использована для моделирования контактного взаимодействия твердых поверхностей в других анизотропных смазочных средах, например, твердосмазочных дисперсий.

ОБОЗНАЧЕНИЯ

A – амплитуда высот; N – нагрузка; R_q – среднеквадратическое отклонение профиля; R_a – шероховатость; $h_{жк}$ – толщина слоя жидкого кристалла в данной точке микрорельефа; E_z , $E_{жк}$, $E_{ст}$ – модуль упругости, соответственно, эквивалентный, жидкого кристалла и стали; δ – глубина ин-

дентирования; t – время; r – радиус шарового индентора; t_p – суммарная площадь сечений на данном уровне.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дерягин Б. В., Поповский Ю. М., Алтоиз Б. А. Исследование жидкокристаллического состояния, возникающего под действием поверхностных сил // Доклады АН СССР, **262** (1982), №4, 853–855
2. Horn R. G., Israelachvili J. N., Perez E. Forces due to structure in a thin liquid crystal films // J. phys., **42** (1981), №1, 39–52
3. Аэро Э. Л., Бессонов Н. М. Микромеханика межконтактных структурированных слоев жидкости // Итоги науки и техники. ВИНТИ сер. «Механика жидкости и газа», **23** (1989), 237–315
4. Tribology and the liquid-crystalline state / Ed. G. Biresaw. American Chemical Society Symposium Series (1990), No.441
5. Kupchinov B. I., Rodnenkov V. G., Ermakov S. F., Parkalov V. P. A study of lubrication by liquid crystals // Tribology International, **24** (1991), №1, 25–28
6. Купчинов Б. И., Родненков В. Г., Ермаков С. Ф. Введение в трибологию жидких кристаллов. Гомель: Инфотрибо (1993)
7. Суслов А. А., Ермаков С. Ф. Жидкие кристаллы в триботехнике (обзор) // Материалы, технологии, инструменты, **2** (1997), №1, 5–11
8. Купчинов Б. И., Ермаков С. Ф., Суслов А. А. Исследование адсорбционных свойств жидкокристаллической присадки // Трение и износ, **15** (1994), №1, 57–61
9. Суслов А. А., Ермаков С. Ф., Чижик С. А., Купчинов Б. И. Влияние жидкокристаллической присадки на микрорельеф поверхности трения стали // Трение и износ, **17** (1996) №1, 67–73
10. Суслов А. А., Чижик С. А. Сканирующие зондовые микроскопы (обзор) // Материалы, технологии, инструменты, **2** (1997), №3, 78–89
11. Сонин А. С. Введение в физику жидких кристаллов. Москва: Наука (1983)
12. Крагельский И. В., Добычин М. Н., Комбаров В. С. Основы расчетов на трение и износ. Москва: Машиностроение (1977)

Suslov A. A., Chizhik S. A., Ermakov S. F., Komkov O. Yu.

Modeling contact interaction of solid surfaces covered with anisotropic lubricating layer.

Using computer simulation, distribution of contact pressure over rough layer covered with boundary liquid-crystalline lubricant film has been analyzed. It was established that the liquid crystals favor more uniform distribution of contact pressure over the rough surface as compared with the model with non-mezogenous lubricant layer. Load capacity of the tribojunction was shown to increase 4.4 times due to presence of anisotropic lubricant layer on the solid surface.

Поступила в редакцию 30.07.98.

© А. А. Суслов, С. А. Чижик, С. Ф. Ермаков, О. Ю. Комков, 1998.