

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	PIHII (Russia) = 0.207	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

SOI: [1.1/TAS](#) DOI: [10.15863/TAS](#)

International Scientific Journal Theoretical & Applied Science

p-ISSN: 2308-4944 (print) e-ISSN: 2409-0085 (online)

Year: 2017 Issue: 08 Volume: 52

Published: 30.08.2017 <http://T-Science.org>

Dmitry Lyubimov

PhD in mechanics
Engineering center L & Co, Ltd, Surgut, Russia
rostexx@rambler.ru

Victor Goldade

Doctor of Science (Eng), Professor in Physics,
Francisk Skorina Gomel State University, Gomel, Belarus
victor.goldade@gmail.com

Anatoly Dunaev

PhD, Head of laboratory
GOSNIITI, Moscow, Russia
Dunaev135@mail.ru

Igor Pustovoi

Technical director, Co Ltd "Real Inproekt"
St.-Petersburg, Russia
realinproekt@mail.ru

SECTION 3. Nanotechnology. Physics.

ESTIMATION THE ULTIMATE SIZE OF THE ANTIFRICTIONAL PROTECTIVE LAYER CONTAINING MINERAL FRICTION MODIFIERS

Abstract: Algorithm is proposed of estimation the ultimate size of lubricating-protective layer arising at presence of mineral friction modifiers. This algorithm is based on quantum-mechanical approach to study the formation of protective antifriction films of dielectric materials on metal surface.

Key words: models of friction, lubricating-protective layer, mineral modifier, wave function, quantum-mechanical approach

Language: Russian

Citation: Lyubimov D, Goldade V, Dunaev A, Pustovoi I (2017) ESTIMATION THE ULTIMATE SIZE OF THE ANTIFRICTIONAL PROTECTIVE LAYER CONTAINING MINERAL FRICTION MODIFIERS. ISJ Theoretical & Applied Science, 08 (52): 89-94.

Soi: <http://s-o-i.org/1.1/TAS-08-52-14> **Doi:**  <https://dx.doi.org/10.15863/TAS.2017.08.52.14>

ОЦЕНКА ПРЕДЕЛЬНОГО ЗНАЧЕНИЯ ТОЛЩИНЫ АНТИФРИКЦИОННОГО ЗАЩИТНОГО СЛОЯ, СОДЕРЖАЩЕГО МИНЕРАЛЬНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ ТРЕНИЯ

Аннотация: Предложен алгоритм оценки предельного значения толщины смазочно-защитного слоя, возникающего в присутствии минеральных модификаторов трения. Алгоритм основан на квантово-механическом подходе к изучению формирования защитных антифрикционных пленок из диэлектрического материала на металлической поверхности.

Ключевые слова: модели трения, смазочно-защитный слой, минеральный модификатор, волновая функция, квантово-механический подход

1. Введение

За более чем 25-летнюю историю использования минеральных добавок к смазочным материалам был достигнут значительный прогресс, как в прикладном плане их использования, так и в раскрытии механизмов их антифрикционного и защитного воздействия на материалы узлов трения [1].

Однако, как показывает анализ, приведенный в недавно опубликованных работах [1, 2], достаточно ясными с теоретической точки зрения являются только представления о самом

начальном этапе образования смазочно-защитного слоя. Дальнейшая его эволюция и связанные с ней механизмы представлены слабо. В частности, совершенно не ясен вопрос о порядке предельных значений толщины такого слоя, хотя данный параметр может оказаться ключевым для оценки износостойкости трибосистем в целом [3, 4].

2. Постановка задачи

Как следует из наиболее общих моделей трения, формирование поверхностных структур

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.234	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

является результатом коллективного действия множества факторов, раскрывающихся в физико-химических механизмах взаимодействия поверхностных слоев трибосопряжений [5, 6]. Именно чрезвычайная сложность подобных процессов не позволяет до настоящего времени создать достаточно корректную модель формирования смазочных слоев в области фрикционного контакта. Тем не менее, весьма обнадеживающе выглядят попытки рассмотрения фрикционного взаимодействия с позиции наиболее фундаментальной физической теории – квантовой механики [7-10].

В этих моделях процессы фрикционного взаимодействия представляются как последовательность актов пассивации и активации поверхностей трения, происходящих вследствие их фрикционного взаимодействия [8, 10]. Эти процессы прекрасно моделируются посредством таких квантовых систем, как потенциальные барьеры и ямы, изменение «размеров» которых отражает способность поверхности твердого тела вступать в химические взаимодействия. Другим важным условием активации поверхности является наличие и постоянное воспроизводство активного вещества, например, находящегося в электрически активном состоянии [5, 11, 12].

В квантовой физике, в частности в физике твердого тела и теории химической связи [13-15], эти состояния вещества описываются с помощью волновых функций Ψ , являющихся носителями информации о состоянии физических систем. Волновая функция – это величина, лишенная определенного физического смысла, представляющая собой некоторое информационное поле. По утверждению одного из классиков квантовой физики Э. Шредингера, волновая функция определяет плотность вещества или его заряда. Значение волновой функции изменяется при взаимодействии компонентов твердого тела с потенциальными барьерами, и по этим изменениям можно судить, в частности, и об изменениях реакционно способных состояний вещества, так как уменьшение величины волновой функции, квадрат модуля которой характеризует плотность вещества (или заряда), свидетельствует о пассивации поверхности трения, в то время как увеличение – об активации последней и увеличении вероятности образования химических связей. В связи с этим возникает вопрос: как оценить изменение волновой функции в условиях трения в среде, содержащей минеральные модификаторы трения?

3. Квантово-механическая модель оценки толщины защитного слоя

В работе [16] рассматривалось изменение волновой функции, описывающей электронную плотность при прохождении электронной волной потенциальных барьеров. Волновая функция имела вид плоской гармонической волны, что упрощало математический аппарат, используемый в данной модели. Однако данный подход слабо применим к поставленной задаче, поскольку неизменность параметров потенциальных барьеров не выполняется в условиях активирующего действия на материал со стороны сил трения.

Для решения поставленной задачи воспользуемся методом, предложенным в работах [17, 18], в котором постулируется возникновение в диэлектрической среде связанных электрически активных состояний, описываемых плосковолновой функцией Ψ и имеющих экситоно-подобный характер. Процесс этот в достаточно упрощенном виде заключается в появлении напротив электрического заряда $+q$, рожденного в процессе контактной электризации (или трибоактивации) поверхности фрикционного контакта его «негативного» отражения $-q$, создающего с исходным зарядом систему экситона. В свою очередь, индуцированный заряд $-q$ проецирует свой антизаряд $+q$, образующие уже второй экситон, и т.д. Как было показано в работах [17, 18], если первый экситон описывается волновой функцией Ψ_a , то второй экситон должен описываться волновой функцией Ψ_b , получаемой из унитарного преобразования, состоящего в двух поворотах на угол $\pi/2$ волнового вектора Ψ_a , что дает следующее значение для Ψ_b :

$$\Psi_b = \frac{1}{2} \Psi_a. \quad (1)$$

Абсолютно аналогично получается и волновая функция Ψ_c :

$$\Psi_c = \frac{1}{2} \Psi_b = \frac{1}{4} \Psi_a. \quad (2)$$

Из соотношений (1) и (2) легко построить общую формулу для оценки изменения значения волновой функции в различных слоях структуры:

$$\Psi_n = (\frac{1}{2})^n \Psi_a, \quad (3)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$

Если основываться на шредингеровском представлении о волновой функции, то плотность зарядовых состояний (т.е. квадрат волновой функции) должна уменьшаться по закону:

$$|\Psi_n|^2 = (\frac{1}{4})^{2n} |\Psi_a|^2. \quad (4)$$

Соответственным образом происходит и снижение химической активности, а также

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.234	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

адгезионной способности каждого последующего слоя.

Рост слоя прекращается, когда значение плотности его активных состояний в поверхности становится столь незначительным, что даже самые слабые сдвиговые усилия отделяют материал поверхности защитной пленки от ее основной массы. С точки зрения квантовой физики, величина волновой функции Ψ_n , описывающей состояние данного слоя, должна быть много меньше исходной величины Ψ_a , что может быть записано в следующей форме:

$$\Psi_a - \Psi_n \leq \Psi_a \quad (5)$$

или с учетом соотношений (1-3)

$$(\frac{1}{2})^n \geq 0. \quad (6)$$

Ноль в правой части неравенства (6) означает очень малую величину, а не полное отсутствие чего-либо, поэтому его вполне можно заменить на некоторое малое значение $\varepsilon > 0$:

$$(\frac{1}{2})^n \geq \varepsilon \quad (7)$$

или

$$2^n \geq \varepsilon^{-1} = E,$$

где E – какая-то постоянная величина.

Допущение (7) абсолютно корректно, так как вполне очевидно, что прекращение роста пленки в условиях динамического контакта поверхностей трибосопряжения наблюдается раньше, чем обнулится величина Ψ_n . Соотношение же (7) легко привести к простейшему логарифмическому уравнению:

$$\log_2 E \geq n. \quad (8)$$

Величина n в уравнениях (3, 6-8) – это целое число, равное количеству слоев, образующихся при трении с участием минеральных модификаторов трения, т.е.:

$$n = H/h, \quad (9)$$

где H – минимальная толщина защитного антифрикционного слоя, h – толщина единичного элементарного слоя.

4. Максимальная толщина защитного слоя с минеральной добавкой

Для нахождения порядка величины H , являющейся предметом настоящей работы, необходимо сделать ряд предположений. Во-первых, в соответствии с предлагаемой моделью, толщина h должна равняться характерному размеру экситона, который в приближении Ванье-Мотта равен [19]:

$$h = \varepsilon \varepsilon_0 \hbar^2 / \mu e^2, \quad (10)$$

где ε_0 – электрическая постоянная, ε – диэлектрическая проницаемость среды, \hbar – постоянная Планка, μ – приведенная масса экситона, близкая к массе электрона, e – заряд электрона.

Диэлектрическая проницаемость серпентиновых пород, которые наиболее часто встречаются в минеральных модификаторах трения, равна 3 [20], поэтому значение h оказывается равным 300 Å, что соответствует расчетным значениям характерных размеров экситонов Ванье-Мотта.

Во-вторых, нам необходимо определить порядок очень большой величины E . Это можно сделать только в рамках некоторых физических допущений, часто составляющих «сердцевину» физической модели, и справедливость которых определяется соответствием получаемых результатов данным эксперимента. Поскольку E характеризует степень «пассивации» внешнего слоя по отношению к первому слою, то следует положить этой величине порядок, соответствующий превышению, которым обладает сильная химическая связь, например, ковалентная, над слабой Ван-дер-Ваальсовой, что в среднем составляет 10^6 раз.

Если величина $E = 10^6$, то логарифм из неравенства (8) от этой величины будет равен 20 и, следовательно, максимальное значение толщины H составляет 6000 Å или 600 нм. Это значение предельно точно совпало с результатами, полученными с помощью атомно-силовой микроскопии поверхностей и приведенными в работах [1, 23].

Рассмотрим особенности структуры сформированного таким образом поверхностного слоя. Во-первых, всякое явление переноса с той или иной степенью точности описывается при помощи уравнения непрерывности, которое в приложении к квантовой теории имеет вид [22]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div } j = 0, \quad (11)$$

где

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) - \text{поток частиц, } n -$$

плотность, m – масса, \hbar – постоянная Планка, i – мнимая единица, ψ – волновая функция, ψ^* – сопряженная волновая функция.

Как было показано в работе [18], для данной системы должно выполняться требование $\partial n / \partial t = 0$ или $n = \text{const}$, что соответствует требованию постоянства содержания вещества в рассматриваемой области фрикционного контакта, которому в квантово-механических расчетах сопоставляется некоторый объем фазового пространства Ω . Кинетика

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	ПИИЦ (Russia) = 0.234	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

формирования защитного слоя на поверхности трения при помощи минеральных модификаторов может описываться путём воздействия на волновую функцию $\psi(t)$, характеризующую фрикционный перенос частиц минерального модификатора трения на поверхность трибосопряжения, унитарного оператора $u(t) = \exp(-iHt/\hbar)$ [22]. В тоже время, поскольку волновые функции ψ имеют вид сферической волны [18], то в силу присущей им

симметрии, в течение некоторого промежутка времени t их пересечение образуют на поверхности объёма фазового пространства Ω , которое, в конечном счёте можно связать с фрикционным контактом, области пересечения $\psi(t)$, формирующие упорядоченную поверхностную систему областей максимальных значений величин $\psi(t)$, которым на Рис. 1 соответствуют заштрихованные сектора.

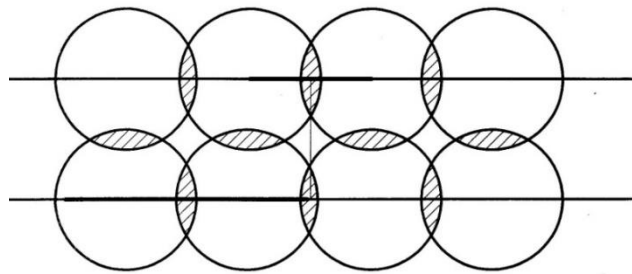


Рисунок 1 - Области перекрытия волновых функций.

В соответствии с физическими свойствами волновой функции, можно сделать весьма обоснованное предположение, что заштрихованным секторам фазового пространства волновой функции $\psi(t)$ соответствуют реальные участки поверхности трения, на которых происходит очаговое формирование создаваемого минеральным модификатором трения защитного слоя. При этом высота каждого такого участка лимитируется уравнением (9) и, как было показано, может достигать значения 6000 \AA (рис. 2а).

Необходимо отметить, что «фрагментальность» при образовании плёнок фрикционного переноса фиксировалась и в металлополимерных трибосистемах, что было отмечено в работе [17] и возможно является фундаментальной закономерностью образования подобных структур.

Идеальный теоретический вид поверхности защитного слоя, формируемого при помощи минеральных модификаторов трения,

полученный при анализе квантово-механических уравнений применительно к фрикционному переносу, передаёт все основные особенности строения аналогичной структуры, обнаруженной при исследовании поверхности трения, обработанной минеральным модификатором, с помощью атомно-силового микроскопа [1] (Рис. 2б). Некоторые отличия в морфологии поверхностей на Рис. 2а и 2б по сути являются несущественными и связаны в первую очередь с двумя факторами: вероятностным характером квантовых процессов и различием условий взаимодействия частиц минерального модификатора с разными участками поверхности трения, к которым можно отнести не только отличие в физико-механическом и химическом состоянии этих участков, но и закономерно имеющиеся различия в размерах и формах частиц минеральных модификаторов трения и соответственно – их различное взаимодействие с поверхностью трения.

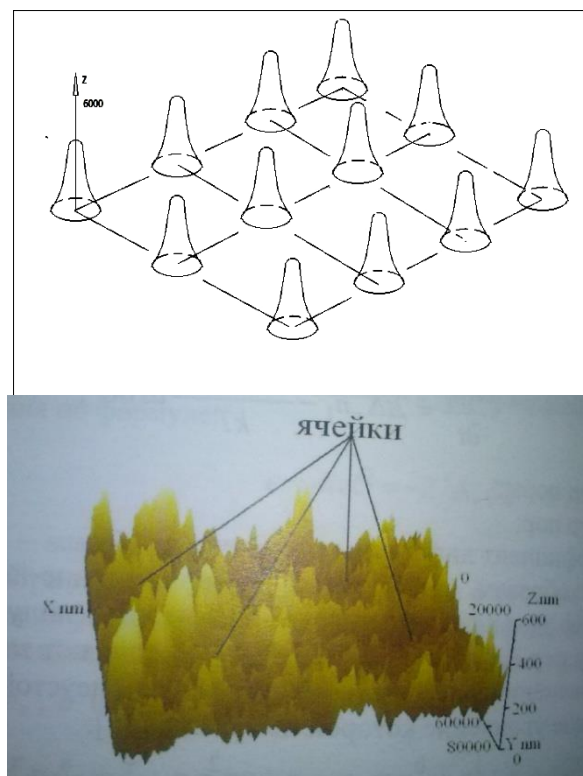


Рисунок 2 - Защитный слой на поверхности трения: а – модель; б – АСМ-изображение.

Вторым важным результатом, вытекающим из рассмотренной квантово-механической модели формирования защитного слоя, является то, что развитая система пор, которая обеспечивает данной структуре адсорбционную активность, создающую условия для возникновения устойчивого «масляного клина» и обеспечивающую высокие антифрикционные характеристики [1, 23], является результатом именно структурообразующих процессов, носящих во многом квантово-механическую природу [10] и отнюдь не связанных с формированием системы трещин, как фактора нестабильности процесса трения, рассмотренного, например, в монографии [1].

Заключение

Предложенный алгоритм оценки максимальной толщины антифрикционной пленки отличается математической простотой, хотя и основан на положениях квантовой физики. Количество используемых в нем допущений значительно меньше, чем у большинства расчетных моделей, созданных для описания микромеханизмов трения, что делает подобный подход более приоритетным в сравнении с ранее используемыми. Его особенность состоит в некоторой «квазимикроскопичности» рассуждений и отсутствии необходимости

анализа, оперирующего понятиями электронных плотностей, механизмов поляризации и т.п., т.е. той детализации, к которой, как правило, сводятся рассуждения о микромеханизмах трения.

Однако, как писал Фейнман, «За анализом природы нет никакого секретного механизма, «колесиков и шестеренок». Если вы хотите понять её, вы должны принять это... Природа позволяет нам вычислить *только вероятности*. Но от этого наука не потерпела краха» [21].

Исходя из сказанного Фейнманом, предложенный алгоритм можно рассматривать, как корректный квантово-механический подход к изучению процесса формирования защитных антифрикционных пленок из диэлектрического материала на металлической поверхности.

Рассмотренная квантово-механическая модель формирования защитного слоя служит подтверждением тезиса, что развитая система пор, которая обеспечивает данной структуре высокие антифрикционные характеристики, является результатом именно структурообразующих процессов, носящих во многом квантово-механическую природу и не связанных с формированием системы трещин как фактора нестабильности процесса трения.

Impact Factor:

ISRA (India) = 1.344	SIS (USA) = 0.912	ICV (Poland) = 6.630
ISI (Dubai, UAE) = 0.829	PIHII (Russia) = 0.234	PIF (India) = 1.940
GIF (Australia) = 0.564	ESJI (KZ) = 3.860	IBI (India) = 4.260
JIF = 1.500	SJIF (Morocco) = 2.031	

References:

1. Dolgoplov K.N., Potekha V.L., Lyubimov D.N. (2013) Tribologiya geomodifitsirovannykh smazochnykh materialov. – Grodno: GGAU, 2013. – 430 p.
1. Dunaev A.V., Sharifullin S.N. (2013) Modernizatsiya iznoshennoi tekhniki s primeneniem tribopreparatov. Kazan: Isd-vo Kazanskogo universiteta, 2013. – 272 p.
2. Sysoev P.V., Bliznets M.M., Pogosyan A.K. (1990) Antifriktsionnye epoksidnye kompozity v stankostroenii. Minsk: Nauka i tekhnika, 1990. – 241 p.
3. Lyubimov D.N., Ryzhikov V.A. (2001) Osnovy teorii treniya. Novochoerkassk: Izd-vo YuRGU, 2001. – 87 p.
4. Bakli D. (1986) Poverkhnostnye yavleniya pri adgesii i friktsionnom vzaimodeistvii. M.: Mashinostroenie, 1986. – 360 p.
5. Khainike G. (1989) Tribokhimiya. M.: Mir, 1989. – 635 p.
6. Lyubimov D.N., Dolgoplov K.N., Pinchuk L.S. (2013) Kvantovaya paradigma tribologii. Rostov-na-Donu: Izd-vo YuFU, 2013. – 206 p.
7. Mikhailova O.V., Vorontsova A.S., Liopo V.A. (2012) Osobennosti energeticheskogo sostoyaniya komponentov metallopolimernykh system. *Vestnik Grodnenskogo universiteta im. Yanki Kupaly*, 2012, № 3 (141). – P. 6-19.
8. Myshkin N.K., Sviridenok A.I., Grigor'ev A.Ya. (2013) Masshtabnyi faktor v tribologii. "Polycomtrib-2013". Tezisy dokladov Mezhdunar. nauchno-tekhnich. conf. Gomel: IMMS NAN Belarysi, 2013. – P. 8
9. Lyubimov D.N., Pinchuk L.S., Dolgoplov K.N. (2012) Kvantovaya tribofizika. Rostov-na-Donu: Izd-vo YuFU, 2012. – 294 p.
10. Zenguil E. (1990) Fizika poverkhnosti. M.: Mir, 1990. – 536 p.
11. Marrel D., Kettl S., Tedder D. (1980) Khimicheskaya svyaz'. M.: Mir, 1980. – 382 p.
12. Kartmell E., Fouls G. (1979) Valentnost' i stroenie molekul. M: Khimiya, 1978. – 360 p.
13. Kittel' Ch. (1978) Vvedenie v fiziku tverdogo tela. M.: Nauka, 1978. – 769 p.
14. Ashkroft N., Mermin M. (1979) Fizika tverdogo tela. V 2-kh tomakh. M.: Mir.
15. Mott N. (1969) Elektrony v neuporyadochennykh strukturakh. M.: Mir, 1969. – 271 p.
16. Lubimov D.N., Goldade V.A., Kolesnikov I.V., (2016) Mel'nikov E.L. Model' obrazovaniya psevdokristallicheskiykh struktur pri perenosе ionov metallov v metallopolimernom tribosopryazhenii. *Remont, vosstanovleniye, modernizatsiya*. 2016. – № 4. – P. 14-20.
17. Goldade V., Lubimov D., Dolgoplov K. (2016) Quantum Model of Charge Transfer in Metal-polymer Electrets / *ISJ Theoretical & Applied Science*, 2016, 06 (38). – p. 10-15.
18. Belyavskii V.I. (1997) Eksitony v nizkorazmernykh sistemakh. *Sorosovskii obrazovatel'nyi zhurnal. Fizika*. 1997, № 5. – P. 93-99.
19. Maslennikov G.M. Kharitonov F.Ya., Kostyukov N.S., Pirogov K.S. (1974) Tekhnologiya elektrokeramiki. M.: Energiya, 1974. – 224 p.
20. Feinman R. (2012) Strannaya teoriya sveta I veschestva. M.: Astral', 2012. – 191 p.
21. Landau L.D., Livshits E.M. (1978) Teoreticheskaya fizika. T. 3. Kvantovaya mekhanika. Nerelyatevistiskaya teoriya. M.: Mir, 1978. – 520 p.
22. Lubimov D.N., Dolgoplov K.N., Kozhemyachenko A.V. (2008) Mekhanizm formirovaniya pokrytii v protsesse petrotribotekhnicheskogo metoda obrabotki metallov treniem. *Vesnik Skhidnoukrainskogo natsional'nogo universitetu im. V. Dalya*. – Lugansk, 2008, № 2. – P. 197-201