

空间滚动轴承 MoS₂ 薄膜三体接触摩擦分析

董绍江¹, 程伟伦¹, 胡小林², 徐向阳¹, 潘雪娇¹

(1.重庆交通大学 机电与车辆工程学院, 重庆 400074;

2.重庆工业大数据创新中心有限公司, 重庆 400707)

摘要: **目的** 针对太空尘导致的固体润滑轴承失效机理难以揭示的问题, 提出采用分子动力模拟的方法, 从原子尺度对空间滚动轴承二硫化钼 (MoS₂) 润滑薄膜的摩擦特性进行研究。**方法** 首先建立 MoS₂ 薄膜的原子模型, 在此基础上, 根据实际场景, 将 MoS₂ 薄膜的摩擦接触条件分为两体和三体接触。其次, 通过对比两体和三体接触的摩擦结果, 探究三体接触条件下 MoS₂ 薄膜的摩擦磨损机理。最后, 通过改变基底结构, 探究粗糙基底对 MoS₂ 薄膜三体接触磨损的影响。**结果** 三体接触对薄膜的磨损和摩擦系数均小于两体接触。在相同的滑移速度下, 磨料的自旋速度越快, 摩擦系数越低, 但薄膜上出现的损伤越多。三体接触条件下, 基底的粗糙表面不利于薄膜吸附, 并且加快了薄膜的磨损。**结论** 三体与两体接触的摩擦磨损机理不同。三体接触摩擦过程中, 薄膜表面不会出现犁削现象进而造成薄膜的撕裂。原子尺度下, 摩擦过程中磨料的自旋作用削弱了薄膜表面切向力的积累, 从而有效减小了摩擦力, 减少了薄膜磨损。在保持磨料滑移速度不变的情况下, 磨料的自旋速度会对薄膜的摩擦和磨损产生影响。在三体接触摩擦过程中, 粗糙基底上的微凸结构阻碍薄膜运动, 增大了摩擦力, 薄膜与基底接触面积的减少削弱了基底与薄膜的吸附性。

关键词: 二硫化钼; 三体接触摩擦; 两体接触摩擦; 分子动力学仿真; 磨损; 摩擦

中图分类号: TH133 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2023)12-0343-08

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2023.12.028

Three-body Contact Friction of MoS₂ Thin Films in Space Rolling Bearings

DONG Shao-jiang¹, CHENG Wei-lun¹, HU Xiao-lin², XU Xiang-yang¹, PAN Xue-jiao¹

(1. School of Mechatronics and Vehicle Engineering, Chongqing Jiaotong University, Chongqing 400074, China;

2. Chongqing Industrial Big Data Innovation Center Co., Ltd., Chongqing 400707, China)

ABSTRACT: Because of the weightless environment of space, space dust can easily enter the spacecraft. In the long time running, the friction pair will produce debris. Space dust and debris can affect mechanical lubrication. It is difficult to reveal the failure mechanism of solid lubricated bearings caused by space dust and debris. The friction characteristics of MoS₂ (molybdenum disulfide) lubricated film of space rolling bearing were studied by molecular dynamic simulation. Fe-Ni-Cr alloy

收稿日期: 2022-10-12; 修订日期: 2023-04-12

Received: 2022-10-12; Revised: 2023-04-12

基金项目: 国家自然科学基金 (51775072); 重庆市科技创新领军人才支持计划项目 (CSTCCCXLJRC201920); 重庆市高校创新研究群体 (CXQT20019); 重庆市北碚区科学技术局技术创新与应用示范项目 (2020-5); 重庆交通大学研究生科研创新项目 (CYS22414)

Fund: The National Natural Science Foundation of China (51775072); Chongqing Science and Technology Innovation Leading Talents Support Program (CSTCCCXLJRC201920); Chongqing University Innovation Research Group (CXQT20019); Technology Innovation and Application Demonstration Project of Chongqing Beibei Science and Technology Bureau (2020-5); Graduate Research and Innovation Project of Chongqing Jiaotong University (CYS22414)

引文格式: 董绍江, 程伟伦, 胡小林, 等. 空间滚动轴承 MoS₂ 薄膜三体接触摩擦分析[J]. 表面技术, 2023, 52(12): 343-350.

DONG Shao-jiang, CHENG Wei-lun, HU Xiao-lin, et al. Three-body Contact Friction of MoS₂ Thin Films in Space Rolling Bearings[J]. Surface Technology, 2023, 52(12): 343-350.

was used as the reference bearing material in the simulation to explore the interaction between the film and the substrate. Firstly, the atomic model of MoS₂ film and Fe-Ni-Cr alloy was established. Based on this, the friction contact conditions of MoS₂ film were divided into two-body contact and three-body contact according to the actual scene. Secondly, the friction and wear mechanism of MoS₂ film under three-body contact condition was explored by comparing the friction results of two-body contact and three-body contact. Finally, the effect of rough substrate on three-body contact wear of MoS₂ film was explored by changing the substrate structure. For the surface, under the condition of two-body contact, the abrasive particles will tear the film, and the ploughing phenomenon will appear under the action of load. Under the condition of three-body contact, there is no tearing or ploughing phenomenon on the surface of the film. The wear of three-body contact is less than that of two-body contact. The friction coefficient of three-body contact is less than that of two-body contact. Under the condition of three-body contact, the rough surface of the substrate is not conducive to the adsorption of thin films and accelerates the wear of thin films. The effect of load on the adsorption of rough substrate and thin film is obvious. When the load exceeds 300 nN, the adsorption energy of rough substrate and thin film will change abruptly. The friction and wear mechanism of three-body contact is different from that of two-body contact. Under the condition of two-body contact, the abrasive particles lead to sliding friction. During the process of motion, the abrasive particles accumulate and release tangential force on the surface of the film (stick-slip phenomenon). When the accumulated tangential force exceeds the strain limit of the film, the film will be destroyed. Under the condition of three-body contact, the abrasive particles have both rolling friction and sliding friction. When the abrasive slip velocity is kept constant, the abrasive spin velocity will affect the friction and wear of the film. In the process of three-body contact friction, there is no ploughing phenomenon on the surface of the film, which leads to the tear of the film. At atomic scale, the spin effect of abrasive particles weakens the accumulation of tangential force on the surface of the film, thus effectively reducing the friction force and the wear of the film. In the process of three-body contact friction, the slight convexity on the rough substrate obstructs the motion of the film and increases the friction force, and the reduction of the contact area between the film and the substrate weakens the absorbability of the substrate and the film.

KEY WORDS: molybdenum disulfide; three-body contact friction; two-body contact friction; molecular dynamics simulation; wear; friction

随着我国航天事业的发展^[1], 对于航天器零部件失效机理的研究就显得尤其重要。轴承作为航天器关键零部件之一, 对其失效机理的研究异常迫切^[2]。空间滚动轴承多采用二硫化钼 (MoS₂) 进行固体润滑^[3-5], 太空环境下运行的轴承受到高低温、原子氧、太空尘和辐射等多种恶劣因素的综合作用^[6]。航天器服役期间, 太空尘和磨屑在轴承内部积累, 改变摩擦接触条件导致轴承极易发生润滑失效。因此, 对不同接触条件的空间滚动轴承 MoS₂ 薄膜摩擦磨损特性进行研究非常重要, 对于提升飞行器的安全运行具有重要意义^[7]。

Tong 等^[8]对微重力下的 MoS₂ 的碰撞摩擦特性进行了模拟分析, 研究了碰撞频率和振幅对 MoS₂ 薄膜摩擦性能的影响。Hu 等^[9]通过分子动力学对多层 MoS₂ 的摩擦特性展开了研究。Pang 等^[10]利用分子动力学对单空位缺陷石墨烯和 MoS₂ 原子尺度下的摩擦进行了数值分析。以上学者都对 MoS₂ 的摩擦特性进行了研究, 并取得了一定成就, 但以上研究都主要聚焦于 MoS₂ 薄膜两体接触的滑动摩擦。轴承运行过程中, 太空尘和磨屑会介入到轴承的润滑中, 使得 MoS₂ 薄膜上将同时存在两体和三体接触摩擦, 并且三体接触的摩擦磨损会在润滑过程中占主导地位^[11]。

许多学者使用分子动力学模拟对磨料三体接触问题展开了研究。Sun 等^[11]研究了纳米级三体和两体磨料在单晶硅上的磨损特征。Eder 等^[12]建立了多磨料颗粒的粗糙表面摩擦模型, 并对不同形状的磨料颗粒进行了磨损分析。Dai 等^[13]研究了单晶硅在不同转速下的纳米压痕机制。上述纳米级的三体磨损研究主要集中在超精密抛光方面, 但作为一种摩擦学现象, 在润滑方面三体磨料磨损还没有得到显著研究。Zhao 等^[14]通过分子动力学研究了石墨烯/h-BN 异质结构薄膜的三体磨料摩擦性能。目前, 大多数的 MoS₂ 摩擦研究以纳米划痕 (即两体接触) 作为研究对象, 而很少有研究关注三体接触条件下的 MoS₂ 薄膜摩擦。

鉴于此, 本文利用分子动力学模拟的方法, 针对 MoS₂ 薄膜三体接触的摩擦磨损特性展开研究。首先在宏观尺度下分析了摩擦副与磨料之间的约束关系, 对两体和三体接触进行了划分^[11], 如图 1 所示。将可以同时进行滑动和滚动摩擦的磨料定义为三体接触, 而只有滑动摩擦的磨料定义为两体接触^[14]。其次, 在原子尺度下, 建立了 MoS₂ 薄膜的摩擦模型, 通过控制磨料的滚动实现 MoS₂ 薄膜的三体接触摩擦模拟, 并与两体接触摩擦进行比较, 探究三体接触的摩擦磨

损机理。最后, 通过改变基底结构, 探究粗糙基底对三体接触摩擦磨损特性的影响。仿真结果表明, 三体接触条件下磨料的滚动有利于降低摩擦力、减少薄膜磨损, 为空间滚动轴承固体润滑的实验提供了理论基础。

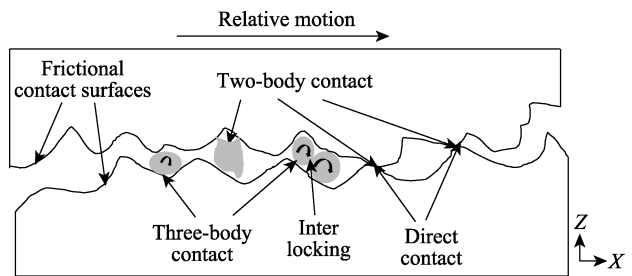


图 1 三体和两体接触宏观模型
Fig.1 Macroscopic models of three-body contact and two-body contact

1 分子动力学建模与模拟

1.1 建立模型

首先在笛卡尔坐标系下建立 MoS₂ 的原子摩擦模型。原子模型分为基底、MoS₂ 薄膜和磨料 3 个部分。虚拟原子与磨料的质心为弹性连接, 在磨料的质心上施加法向载荷, 并在 X 轴方向施加滑移速度。当磨料可以绕质心进行自旋时, 表示 MoS₂ 薄膜和磨料为三体接触; 当磨料不能绕质心进行自旋时, 表示 MoS₂ 薄膜和磨料为两体接触。因此, 不同接触条件下的 MoS₂ 薄膜和磨料摩擦可以使用相同的原子模型表示, 通过磨料是否存在自旋运动, 区分 MoS₂ 薄膜和磨料的接触条件, 如图 2 所示。

基底材料由轴承钢 Fe_{0.6}Ni_{0.2}Cr_{0.2} 合金组成, 既模拟了 MoS₂ 在轴承上的润滑, 又保证了基底的硬度^[15]。

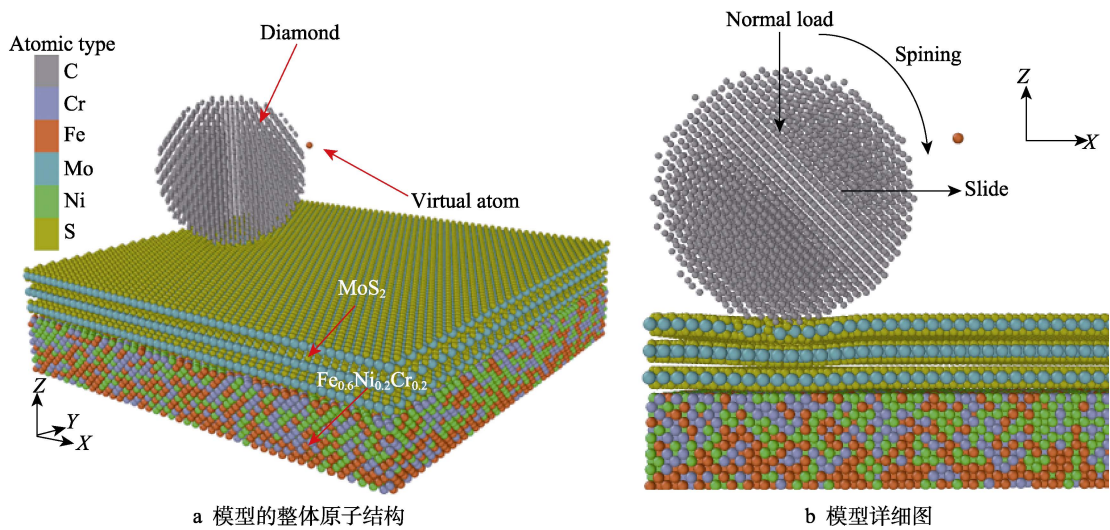


图 2 磨料磨损原子模型
Fig.2 Atomic model of abrasive wear:a) overall atomic structure of the model; b) detailed diagram of the model

磨料为半径 0.3 nm 的球体, 由金刚石结构排列的 C 原子组成^[16], 其晶格常数为 5.439 5。MoS₂ 的晶格结构与石墨烯相似, 为平面六角阵列的层状结构^[17-18]。因为其具有较低的摩擦力和优秀的耐磨性, 常作为固体润滑剂使用。模型各个部分的具体尺寸见表 1。

表 1 型号尺寸参数 Tab.1 Model and size parameters		
Group	Size/nm ³	Atomicity
Abrasive	$\frac{4}{3}\pi \times 0.3^3$	2 052
MoS ₂	16.0×16.0×2.1	14 172
Substrate	16.0×16.0×2.1	13 206

1.2 势函数

势函数是分子动力学模拟中描述原子间相互作用关系的函数。因为原子间的作用关系不同, MoS₂、Fe_{0.6}Ni_{0.2}Cr_{0.2} 和金刚石之间选择的势函数和参数存在差别。对于 MoS₂ 和金刚石原子, 选择反应经验键级 (Reactive Empirical Bond-Order, REBO) 势函数进行原子间作用力的计算。关于 REBO 势函数还原金刚石和 MoS₂ 性能的问题, Stuart 等^[19]和 Liang 等^[20-21]已经进行了充分的证明, 不再过多赘述。与常规的势函数不同, REBO 势函数用键级取代了固定的化学键关系, 通过计算键级来判断原子成键的优先关系。这表示在模拟过程中允许发生化学键的形成和断裂, 能更好地模拟出化学反应。每对共价键原子通过一个电势相互作用:

$$E_{ij}^{\text{REBO}} = V_{ij}^{\text{R}}(r_{ij}) + b_{ij}V_{ij}^{\text{A}}(r_{ij}) \tag{1}$$

式中: E_{ij}^{REBO} 为 i 原子和 j 原子间的势能; V_{ij}^{R} 和 V_{ij}^{A} 是成对存在的排斥力和吸引力; b_{ij} 是键级项。

由于 $\text{Fe}_{0.6}\text{Ni}_{0.2}\text{Cr}_{0.2}$ 原子间由金属键连接, 所以选用嵌入式原子法 (Embedded Atom Method, EAM) 势函数^[22]。对于 N 个原子构成的系统, 其总能量 E 的表达式为:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i_1}^{i_N} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F_i(\rho_i) \quad (2)$$

$$\rho_i = \sum_{j=i_1}^{i_N} \rho_j^a(r_{ij}) \quad (3)$$

式中: $\phi_{ij}(r_{ij})$ 为原子 i 和 j 之间成对的能量; r_{ij} 为原子间距离; $F_i(\rho_i)$ 为原子 i 嵌入材料中的嵌入能量; ρ_i 为与原子 i 位置相关的局部电子密度; $\rho_j^a(r_{ij})$ 为原子 j 到达 i 位置的原子电子密度贡献。

对于 MoS_2 、 Fe-Ni-Cr 合金和金刚石之间的原子作用力, 选择使用 Lennard-Jones 势^[23], 其公式为:

$$E = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], r < r_c \quad (4)$$

式中: ε 为 2 种元素间的能量常数; σ 为 2 种元素间的作用距离; r_c 为 Lennard-Jones 势作用力的截止值。各个元素之间的 Lennard-Jones 势参数见表 2^[24]。

表 2 各元素 Lennard-Jones 势参数
Tab.2 Lennard-Jones potential parameters
of each element

Element	ε	σ	Element	ε	σ
Mo-Fe	0.001 170 0	2.656 7	S-Fe	0.002 588 1	3.094 5
Mo-Ni	0.001 256 8	2.621 9	S-Ni	0.002 780 0	3.059 8
Mo-Cr	0.001 256 8	2.706 1	S-Cr	0.002 780 0	3.144 0

1.3 模拟条件与计算

分子动力学计算通过软件 LAMMPS 实现, 模拟空间在 XY 方向上设置为周期性边界条件, 而 Z 轴方向上设置为固定边界, 其目的是使有限的模型尺寸可以模拟更大的原子系统, 避免边界效应。使用微正则系综 (NVE) 与郎之万热恒温器 (Langevin Thermostat) 对模拟环境进行控制。采用 NVE 系综可以保障系统中原子数 (N)、体积 (V) 和能量 (E) 守恒。Langevin 控温的原理是计算原子的力, 调节原子的速度, 达到控温的效果, 力的大小和方向通过均匀随机数决定。其公式如式 (5) ~ (7) 所示。

$$F = F_c + F_f + F_r \quad (5)$$

$$F_f = -\frac{m}{\lambda_{\text{damp}}} v \quad (6)$$

$$F_r \propto \sqrt{\frac{k_B T m}{dt \lambda_{\text{damp}}}} \quad (7)$$

式中: F_c 为原子间作用力计算的保守力场; F_f 为与原子速度成正比的摩擦阻力或黏性阻尼项; m 为

原子质量; λ_{damp} 为阻尼因子; F_r 为温度 T 下溶剂原子与粒子随机碰撞产生的力; k_B 为玻尔兹曼常数; T 为期望温度; dt 为时间步大小。

根据空间滚动轴承的运行工况, 将模拟环境温度设置为 3 K, 接触载荷设置为 200~700 nN, 滑移速度设置为 5 m/s, 时间步长设置为 0.002, 运行 100 万步, 使磨料滑移 10 nm。模拟过程中, 将厚度为 0.5 nm 的基底原子的受力和速度设置为 0, 作为刚性层, 其目地是对模型进行固定, 防止摩擦过程中出现不正常的偏移。设置虚拟原子, 虚拟原子与磨料间为弹性连接。通过对虚拟原子设置 Z 方向上的载荷和 X 方向上的滑移速度, 将运动和载荷施加到磨料上。磨料设置为刚体, 通过约束磨料的旋转自由度, 实现磨料的两体和三体接触条件。模拟过程中, 计算各个部分之间的相互作用力、温度和速度, 每隔一段时间, 对计算量的平均值进行一次输出。平均摩擦力、有效摩擦系数以及吸附能的计算公式为:

$$F = \frac{1}{N} \sum_{i=n_i}^{n_o} f_i \quad (8)$$

$$u_{\text{ef}} = \frac{F_t}{F_n} \quad (9)$$

$$E_{\text{abs}} = E_{\text{FeNiCr+MoS}_2} - E_{\text{FeNiCr}} - E_{\text{MoS}_2} \quad (10)$$

式中, n_i 和 n_o 表示开始时间和结束时间; f_i 为 i 时刻受到的力; u_{ef} 为有效摩擦系数; F_t 和 F_n 为切向力和法力的平均值; E_{abs} 表示吸附能; $E_{\text{FeNiCr+MoS}_2}$ 表示基底与薄膜系统的总势能; E_{FeNiCr} 表示 FeNiCr 基底的总势能; E_{MoS_2} 表示 MoS_2 薄膜的总势能。

2 结果与分析

分子动力学模拟以 MoS_2 薄膜的三体接触摩擦特性为主要研究对象, 首先, 改变接触条件和磨料载荷模拟两体和三体接触摩擦, 对比与两体接触的差异, 分析三体接触的摩擦机理; 其次, 改变磨料的自旋速度, 探究自旋速度对薄膜摩擦磨损的影响; 最后, 改变基底结构, 探究粗糙基底对三体接触摩擦的影响。

2.1 MoS_2 薄膜三体接触摩擦机理分析

首先研究两体和三体接触条件对薄膜表面磨损的影响, 模拟结果显示, 在 200 nN 载荷下, 三体接触摩擦对 MoS_2 薄膜造成的损伤要小于两体接触摩擦, 如图 3 所示。从图 3 可以看出, 三体接触条件下, 薄膜的磨痕长度小于两体接触, 原因是三体接触条件下磨料的初始转动速度过小, 摩擦初期, 滑动摩擦占主导, 造成薄膜的损伤, 当滚动摩擦占据主导后, 磨料对薄膜的损伤开始削弱。通过不断增加磨料的载荷, 发现 2 种接触条件下, 薄膜的损伤机理有所区别。对于两体接触, 摩擦过程中磨料的犁削现象是导致薄

膜磨损的主要原因,随着载荷的增加,犁削的深度增加,并加速薄膜的磨损。三体接触中,磨料存在自旋,摩擦过程中磨料对薄膜积累的切向力会随着磨料的滚动被释放,因此磨料的前端不会出现薄膜的堆积和撕裂现象。

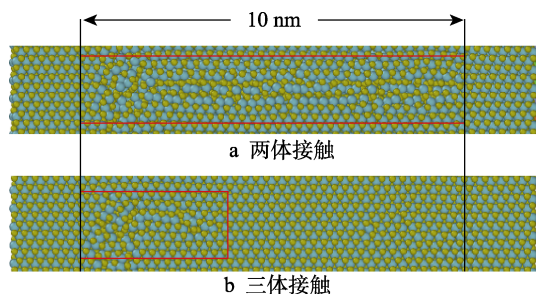


图 3 MoS₂ 膜在 200 nN 负载下的磨损情况
Fig.3 Wear of MoS₂ film under 200 nN load:
a) two-body contact; b) three-body contact

700 nN 载荷下,不同接触条件的薄膜变化如图 4 和图 5 所示。从两体接触的薄膜磨损变化结果可以看出,薄膜上出现了沟壑(见图 4a),在磨料作用下,薄膜出现堆叠到撕裂的过程(见图 4b、c)。相同条件下的三体接触摩擦结果显示,磨料的自旋会使薄膜在磨料的后端出现褶皱。通过计算 2 种接触条件的摩擦力和摩擦系数,对比分析三体接触的摩擦特性,结果见图 6 和表 3。

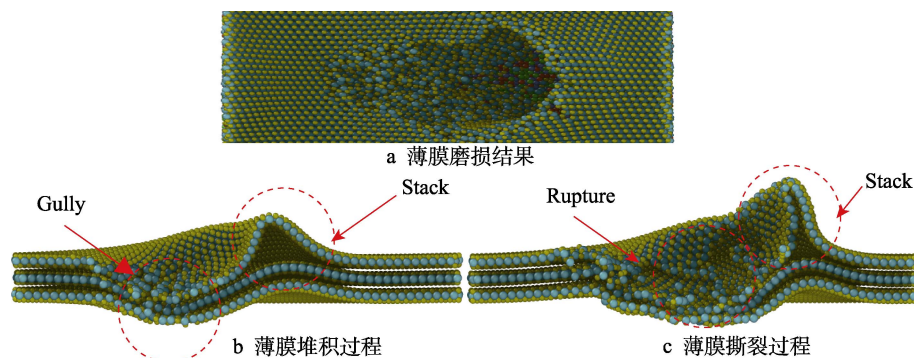


图 4 700 nN 载荷下 MoS₂ 膜的两体接触磨损
Fig.4 Two-body contact wear of MoS₂ film under 700 nN load:
a) film wear results; b) film stacking process; c) film tearing process

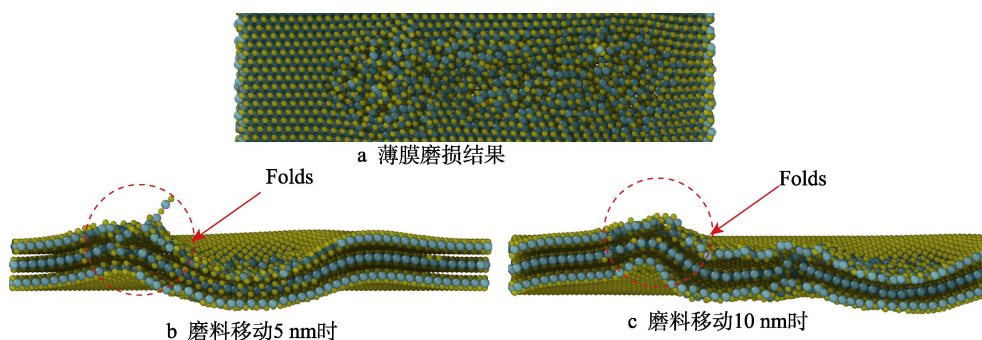


图 5 MoS₂ 膜在 700 nN 载荷下的三体接触磨损
Fig.5 Three-body contact wear of MoS₂ film under 700 nN load:
a) film wear results; b) when the abrasive moves 5 nm; c) when the abrasive moves 10 nm

从图 6 可看出,三体接触的摩擦力小于两体接触,并且曲线平滑。随着载荷的增加,2 种接触条件的摩擦力曲线差距更为明显。两体接触滑动摩擦过程中的黏滑效应^[25](即滑动摩擦过程中存在阻碍运动的黏附阶段和促进运动的滑动阶段)是导致摩擦力曲线波动的原因。两体和三体接触摩擦的主要区别在于磨料运动过程中是否存在自旋。通过表 3 可以看出,三体接触的摩擦系数要远远小于两体接触,这与宏观下滚动摩擦的摩擦力比滑动摩擦小的规律相符。两体和三体接触的摩擦模拟结果表明,在微观摩擦中,磨料的滚动可以减小摩擦,降低磨损。

2.2 自旋速度对 MoS₂ 薄膜三体接触摩擦特性的影响

在实际润滑过程中,每个磨料的受力存在差异,会导致磨料的自旋速度发生改变。为此,控制磨料的自旋速度,探究磨料自旋速度对 MoS₂ 薄膜三体接触摩擦特性的影响。在参数设置时,只改变磨料的自旋速度,其余参数不变。重复模拟过程,将自旋速度/滑移速度比定义为 $\lambda = r \cdot \omega / v$,对 λ 为 0.5、1、1.5、2 等 4 种状态进行模拟。通过对比不同自旋速度下磨料的两体接触摩擦结果发现,磨料的自旋速度越快,磨料与 MoS₂ 薄膜间的摩擦系数越低。不同自旋速度的摩擦力对比曲线如图 7 所示,摩擦系数见表 4。

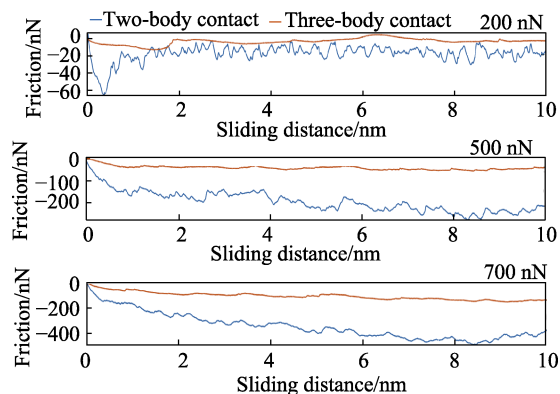


图6 不同接触条件下摩擦力的比较
Fig.6 Comparison of friction force under different contact conditions

表3 2种接触条件不同载荷下磨料的平均摩擦系数
Tab.3 Average friction coefficient of abrasives under different loads in two contact conditions

Load/nN	Two-body contact	Three-body contact
200	0.092	0.022
300	0.204	0.043
400	0.360	0.052
500	0.381	0.078
600	0.455	0.104
700	0.515	0.142

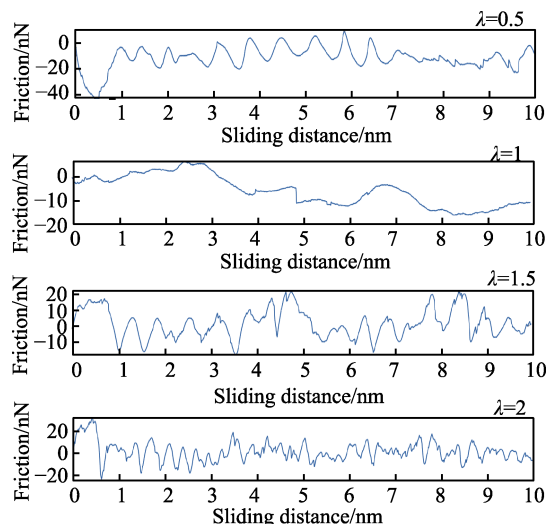


图7 不同 λ 值下摩擦力的比较
Fig.7 Comparison of friction at different λ

表4 不同 λ 值下 MoS_2 的平均摩擦系数
Tab.4 Average friction coefficient of MoS_2 at different λ

λ	Friction coefficient
0.5	0.058
1	0.032
1.5	0.008
2	0.005

通过图7可以看出,不同 λ 值下摩擦力有不同的变化。当 $\lambda \leq 1$ 时,摩擦力的平均值为负,说明磨料在运动方向上受到阻碍;当 $\lambda > 1$ 时,摩擦力的平均值为正,说明磨料在运动方向上受到促进。造成这种现象的原因主要是因为磨料自旋速度与滑移速度存在差值。磨料的运动可以拆分为2部分:其一为磨料整体的滑移运动;其二为磨料内原子自旋的滚动运动。在恒定的滑移速度下,对不同 λ 值的磨料运动进行分析。磨料运动过程中,原子以磨料质心的Y轴进行旋转,在XZ平面上,磨料内原子的运动轨迹可以看似为半径 $r \leq 0.3 \text{ nm}$ 的圆。将磨料内原子的旋转角速度转化为瞬时的线速度,当 $\lambda = 1$ 时,磨料的滑动速度与 $r = 0.3 \text{ nm}$ 的原子线速度相同,因此磨料在运动过程中, $r = 0.3 \text{ nm}$ 的原子与薄膜不会发生额外的相对运动;当 $\lambda < 1$ 时,磨料的滑动速度大于 $r = 0.3 \text{ nm}$ 的原子线速度,磨料在运动过程中, $r = 0.3 \text{ nm}$ 的原子与薄膜会发生额外的相对运动,并且对磨料的运动产生阻碍;当 $\lambda > 1$ 时,磨料的滑动速度小于 $r = 0.3 \text{ nm}$ 的原子线速度,磨料在运动过程中, $r = 0.3 \text{ nm}$ 的原子与薄膜也会发生额外的相对运动,但对磨料的运动有促进作用。通过表4的摩擦系数对比可以明显看出,磨料自旋速度对摩擦运动带来影响, λ 值越大,磨料的自旋速度越快,磨料摩擦过程中的摩擦系数越低。同时,探究了不同 λ 值的磨料三体接触摩擦对薄膜磨损的影响,不同 λ 值下磨料在薄膜上滑移了10 nm,其结果如图8所示。

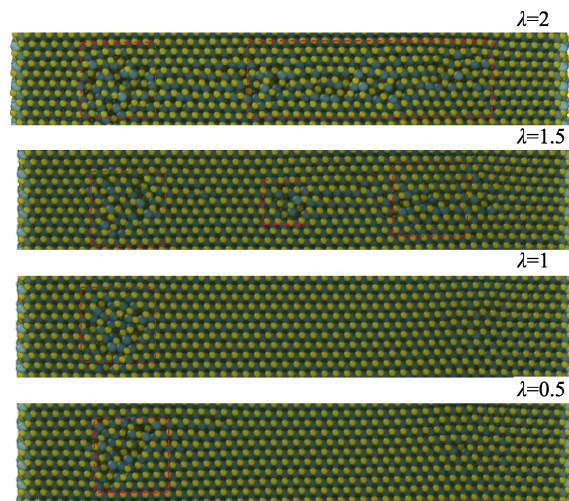


图8 不同 λ 值下薄膜磨损结果比较
Fig.8 Comparison of film wear results at different λ

通过图8可以看出,随着 λ 值的增大,磨料运动过后薄膜上的磨损越多(红色虚线标记部分)。造成这一现象的原因依旧是磨料自旋速度与滑移速度存在差值,磨料的自旋速度越快,相同时间下薄膜要与更多的磨料原子发生相互作用,使得薄膜上的原子更容易发生位移,从而改变原子排列。

2.3 粗糙基底对 MoS₂ 薄膜三体接触摩擦特性的影响

实际润滑程中, 润滑表面存在粗糙结构, 因此将基底变为非平滑表面, 探究粗糙基底对薄膜摩擦特性是否存在一定的影响^[12]。通过正余弦函数将指定范围内的 Fe-Ni-Cr 合金原子删除, 使基底表面出现微凸结构, 如图 9 所示。

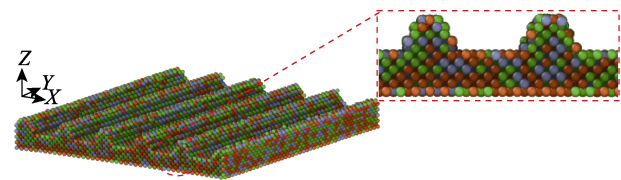


图 9 Fe-Ni-Cr 合金基体的粗糙表面
Fig.9 Rough surface of Fe-Ni-Cr alloy substrate

只改变基底结构, 重复三体接触摩擦模拟过程, 并与光滑基底的三体接触摩擦结果进行对比。700 nN 载荷下, 粗糙基底的薄膜磨损程度要大于光滑基底, 并且摩擦过程中薄膜与粗糙基底的吸附作用也弱于光滑基底, 不同基底磨料滑动 10 nm 的结果如图 10 所示, 红色虚线标出了 2 种基底的磨损差异。从图 10a 可以看出, 粗糙基底的微凸结构对薄膜的层状结构造成破坏, 而在摩擦过后光滑基底上的薄膜可以明显区分出层状结构 (圆形标记处)。从图 10b 可以看出, 在载荷作用下, 粗糙基底上的薄膜形变明显于光滑基底。

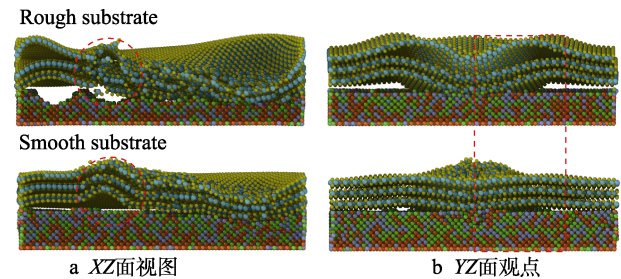


图 10 700 nN 载荷下磨料滑动 10 nm 的磨损结果比较
Fig.10 Comparison of wear results under 700 nN load when abrasive moves 10 nm: a) XZ side view; b) YZ plane

为了探究基底对薄膜三体接触摩擦特性的影响, 计算了薄膜的摩擦系数、薄膜与基底的相互作用力和吸附能。薄膜与基底的吸附能曲线如图 11 所示。可以看出, 相同基底条件下, 随着载荷的增加, 基底和薄膜间的吸附能会呈下降趋势, 并且粗糙基底与薄膜的吸附作用受载荷的影响较大, 吸附能的变化范围 (0.5 eV) 要大于光滑基底的 (0.06 V)。摩擦过程中不同基底与薄膜间的作用力曲线如图 12 所示, 微凸结构使粗糙基底与薄膜间的作用产生波动。2 种基底的摩擦系数对比见表 5, 粗糙基底上的薄膜摩擦系数要大于光滑基底。不同基底与薄膜间的作用力和吸附

能以及薄膜的摩擦系数, 都表明了粗糙基底上的微凸结构对三体接触的摩擦具有阻碍作用。

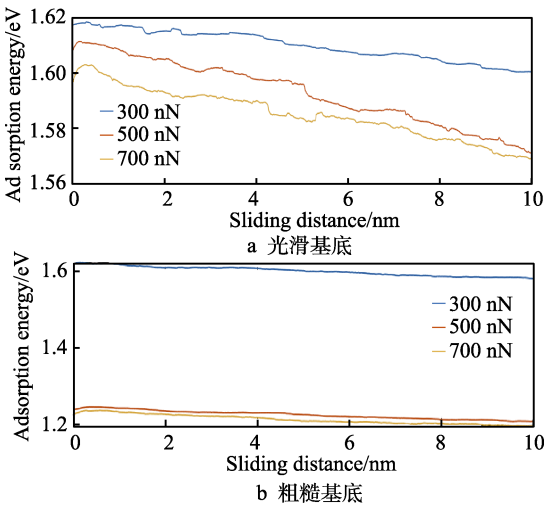


图 11 不同基底的势能变化曲线
Fig.11 Potential energy variation curves of different substrates: a) smooth substrate; b) rough substrate

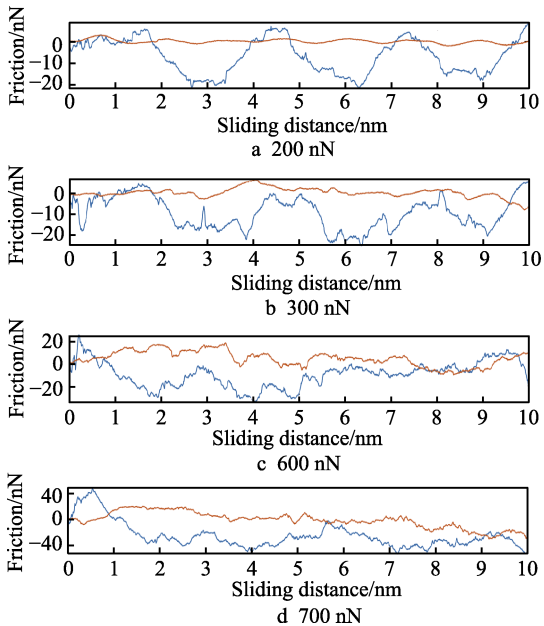


图 12 部分加载基板与薄膜之间的作用力对比
Fig.12 Comparison of applied forces between partially loaded substrate and thin film

表 5 不同载荷下磨料的平均摩擦系数
Tab.5 Average friction coefficient of abrasives under different loads

Load/nN	Rough basal	Smooth basal
200	0.075	0.022
300	0.090	0.043
400	0.116	0.052
500	0.141	0.078
600	0.183	0.104
700	0.248	0.142

3 结论

由于太空环境的特殊性,航天器内部的滚动轴承多以 MoS_2 进行固体润滑。在长时间的运行过程中,太空尘和磨屑会改变轴承内部的润滑接触条件,极易导致薄膜的润滑失效。为探究接触条件改变(即三体接触)对 MoS_2 薄膜润滑的影响,进行了分子动力学模拟。首先对比了三体和两体接触的摩擦结构,分析了三体接触的摩擦磨损机理。然后通过改变基底结构,探究粗糙基底对 MoS_2 薄膜三体接触摩擦的影响。最后得到以下主要结论:

1) 两体接触磨料磨损的摩擦过程中,切向力的积累是导致薄膜磨损的关键。滑动过程中,磨料会对薄膜表面造成犁削作用,导致薄膜堆积和撕裂。三体接触磨料磨损摩擦过程中,磨料的滚动会对切向力的积累进行削弱,从而避免了磨料对薄膜的犁削作用。

2) 原子尺度下,磨料滚动摩擦产生的摩擦力要远小于滑动摩擦。滚动摩擦对薄膜的磨损也要远低于滑动摩擦,使得薄膜能够保持更完整的层状结构,拥有更低的摩擦力。

3) 在相同滑移速度下,磨料自旋速度的改变会影响与薄膜的摩擦和磨损。磨料自旋速度越快,摩擦系数越低,但薄膜的磨损增加。

4) 粗糙基底的粗糙凸结构会对三体接触条件下薄膜的摩擦磨损特性产生影响,表现为对摩擦运动的阻碍,加重薄膜的磨损,以及削弱薄膜与基底之间的吸附作用。

参考文献:

- [1] LESLIE M. A Chinese Lander Explores the far Side of the Moon[J]. Engineering, 2019, 5(4): 598-599.
- [2] QUARANTA E, DAVIES P. Emerging and Innovative Materials for Hydropower Engineering Applications: Turbines, Bearings, Sealing, Dams and Waterways, and Ocean Power[J]. Engineering, 2022, 8: 148-158.
- [3] SPALVINS T. Coatings for Wear and Lubrication[J]. Thin Solid Films, 1978, 53(3): 285-300.
- [4] FUSARO R L. Effect of Substrate Surface Finish on the Lubrication and Failure Mechanisms of Molybdenum Disulfide Films[J]. A S L E Transactions, 1982, 25(2): 141-156.
- [5] SPALVINS T. Deposition of MoS_2 Films by Physical Sputtering and Their Lubrication Properties in Vacuum[J]. A S L E Transactions, 1969, 12(1): 36-43.
- [6] LU Yi-fan, SHAO Qi, YUE Hong-hao, et al. A Review of the Space Environment Effects on Spacecraft in Different Orbits[J]. IEEE Access, 2019, 7: 93473-93488.
- [7] COLAS G, SAULOT A, GODEAU C, et al. Decrypting Third Body Flows to Solve Dry Lubrication Issue- MoS_2 Case Study under Ultrahigh Vacuum[J]. Wear, 2013, 305 (1/2): 192-204.
- [8] TONG Rui-ting, HAN Bin, ZHANG Xiao, et al. Molecular Dynamics Simulation on Collision Frictional Properties of a Molybdenum Disulfide (MoS_2) Film in Microgravity Environment[J]. Microgravity Science and Technology, 2021, 33(4): 47.
- [9] HU Cheng-zhi, YI Chang-li, BAI Min-li, et al. Molecular Dynamics Study of the Frictional Properties of Multilayer MoS_2 [J]. RSC Advances, 2020, 10(30): 17418-17426.
- [10] PANG Hao-sheng, WANG Hong-fa, LI Ming-lin, et al. Atomic-Scale Friction on Monovacancy-Defective Graphene and Single-Layer Molybdenum-Disulfide by Numerical Analysis[J]. Nanomaterials, 2020, 10(1): 87.
- [11] SUN Jia-peng, FANG Liang, HAN Jing, et al. Abrasive Wear of Nanoscale Single Crystal Silicon[J]. Wear, 2013, 307(1-2): 119-126.
- [12] EDER S J, BIANCHI D, CIHAK-BAYR U, et al. An Analysis Method for Atomistic Abrasion Simulations Featuring Rough Surfaces and Multiple Abrasive Particles [J]. Computer Physics Communications, 2014, 185(10): 2456-2466.
- [13] DAI Hou-fu, ZHANG F, ZHOU Yu-qi, et al. Numerical Study of Three-Body Diamond Abrasive Nanoindentation of Single-Crystal Si by Molecular Dynamics Simulation [J]. Applied Physics A, 2019, 125: 1-10.
- [14] ZHAO Bo, ZHANG Yu-tao, FAN Yu-yan, et al. The Three-Body Abrasive Tribological Characteristics of the Graphene/h-BN Heterostructure Film Considering Defects [J]. Tribology International, 2022, 171: 1-11.
- [15] ZHANG Fu-cheng, YANG Zhi-nan. Development of and Perspective on High-Performance Nanostructured Bainitic Bearing Steel[J]. Engineering, 2019, 5(2): 319-328.
- [16] BAI Li-chun, SRIKANTH N, KANG Guo-zheng, et al. Influence of Third Particle on the Tribological Behaviors of Diamond-Like Carbon Films[J]. Scientific Reports, 2016, 6: 38279.
- [17] LI He, WANG Jin-huan, GAO Song, et al. 2D Materials: Superlubricity between MoS_2 Monolayers (Adv. Mater. 27/2017)[J]. Advanced Materials, 2017, 29(27): 1-6.
- [18] LI Hai, YIN Zong-you, HE Qi-yuan, et al. Fabrication of Single- and Multilayer MoS_2 Film-Based Field-Effect Transistors for Sensing NO at Room Temperature[J]. Small, 2012, 8(1): 63-67.
- [19] STUART S J, TUTEIN A B, HARRISON J A. A Reactive Potential for Hydrocarbons with Intermolecular Interactions [J]. The Journal of Chemical Physics, 2000, 112(14): 6472-6486.
- [20] LIANG Tao, PHILLPOT S R, SINNOTT S B. Parametrization of a Reactive Many-Body Potential for Mo-S Systems[J]. Physical Review B, 2009, 79(24): 245110.
- [21] LIANG Tao, PHILLPOT S R, SINNOTT S B. Parametrization of a Reactive Many-Body Potential for Mo-S Systems[J]. Physical Review B, 2009, 79(24): 245110.

(下转第 368 页)