

CSTAM2012-D01-0085

薄膜润滑系统的粗粒化原子模拟研究进展

武作兵¹⁾

(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)

摘要: 流体润滑系统是很多自然现象、工程应用以及现实生活中的关键基础问题。该过程包含由一层流体(例如: 润滑剂、吸附的水分或蒸气等)分开的两个固体表面的相对滑移, 但同时又是一个多层次空间尺度的具体例子。产生的摩擦响应从原子(分子)尺度的相互作用一直过渡到宏观尺度, 表现为宏观上流体介质在载荷和剪切作用下所引起的变化由微观上流体原子(分子)之间的关联长度和关联时间来表征。而工程实际中由于计算能力所限使得摩擦行为分析通常是基于连续近似假设, 使得固体-流体界面区强烈的各向异性特征被忽略。本文报告了针对在薄膜润滑系统所发展的粗粒化模拟的理论方法和应用。首先, 采用全原子模拟方法, 指出固体基底的弹性变形对薄膜润滑系统的摩擦应力具有显著影响。其次, 通过将薄膜和基底近壁区处理为原子状态, 而将基底远区采用有限元描述并耦合起来, 建立多尺度系统模型。在统计力学框架内, 发展具有动力学约束和自由能修正的粗粒化原子模拟方法。数值模拟研究表明, 虽然具有动力学约束的准连续方法能够准确地预测系统的摩擦应力曲线, 但壁间距曲线仍有偏差。而自由能修正的准连续方法可以很好地给出系统的剪应力和壁间距曲线。进一步分析了单元网格对薄膜润滑系统粗粒化原子模拟的影响。

关键词: 薄膜润滑; 弹性基底; 摩擦力; 粗粒化原子模拟

¹⁾Email: wuzb@lnm.imech.ac.cn