

MS5731

薄膜润滑系统的多尺度模拟研究

武作兵¹

1. 中国科学院力学研究所 LNM, 北京 100190

E-mail: wuzb@lnm.imech.ac.cn

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、吸附的水分或蒸汽等）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刚性固体基底，一方面使得固体-流体界面区强烈的各向异性特征被忽略，另一方面使得固体基底的弹性变形对系统剪应力的影响被忽略。前期我们将有限温度下固体系统的准连续方法有效地建立起来，粗粒化过程中被束缚的非节点原子振动可以通过自由能修正克服[Wu et al *J Chem. Phys.*, 119,8013(2003); 121, 9279(2004)]。这里，我们将组合该粗粒化方法和原子模拟处理含有弹性固体基底的薄膜润滑系统。在固体基底远区的有限元粗粒化过程中采用局域和非局域单元覆盖。研究表明，采用局域单元覆盖的自由能修正粗粒化和原子模拟混合方法能够有效地预测出系统全原子模拟的系统热力学参量，即剪应力，平均分离距离和横向应力曲线。但是，非局域单元覆盖的自由能修正粗粒化方法在连续和原子描述混合区可导致系统非物理滑移，这主要是基底近壁区非各项均匀同性分布在局部谐波近似中产生偏离。当混合区的自由能近似被舍去而保持动力学约束的粗粒化，所建立起来的多尺度模拟方法能够很好地预测出系统全原子模拟的系统热力学参量，即剪应力，平均分离距离和横向应力曲线。所产生的热力学量的相对误差仅在几个百分数之内。感谢国家自然科学基金委通过项目 No.1172310 的支持，感谢中国科学院超算中心和中国科学院力学研究所计算平台的协助。

Keywords: 薄膜润滑;弹性基底;摩擦力;粗粒化原子模拟;

Preferred Presentation Type: