

УДК 678.7

**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПОНЕНТОВ  
НАНОКОМПОЗИТА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ**

**VISUALIZATION PROCESS OF THE INTERACTION  
NANOCOMPOSITE COMPONENTS USING MOLECULAR MODELING**

*П.В. КОРОЛЕВ, Е.Н. КАЛИНИН, М.А. ШИЛОВ*  
*P.V. KOROLYOV, E.N. KALININ, M.A. SHILOV*

(Ивановский государственный политехнический университет. Текстильный институт)  
(Ivanovo State Polytechnical University. Textile Institute)  
E-mail: ttp@ivgpu.com

*В статье рассмотрен способ получения качественных характеристик взаимодействия компонентов нанокпозиционного материала с помощью методов молекулярного моделирования.*

*This article describes a way to obtain high-quality characteristics of the interaction of components of the nanocomposite material using methods of molecular modeling.*

**Ключевые слова:** молекулярное моделирование, нанокпозиционные материалы, качественные характеристики.

**Keywords: molecular modeling, nanocomposite materials, quality characteristics.**

Одной из наиболее актуальных проблем синтеза новых композиционных материалов является создание компьютерного инструмента, позволяющего прогнозировать функциональные параметры объекта применительно к условиям его эксплуатации. К наиболее перспективным в этом плане, с нашей точки зрения, представляются нанокomпозиционные системы на волокнистой основе, приобретающие функциональные особенности конструкционного материала [1].

Одним из возможных путей решения задачи прогнозирования комплекса их свойств является применение методов молекулярного моделирования, в частности, молекулярной динамики, которые позволяют исследовать структуры, обладающие сложной пространственной конфигурацией и множеством параметров, определяющих свойства исследуемой системы как конструкционного материала, в процессе ее синтеза. В настоящее время актуальна разработка алгоритмов, позволяющих решать обозначенные задачи применительно к широкому спектру свойств компонентов, образующих вновь синтезируемый композиционный материал [2].

Цель синтеза модели нанокomпозиционного материала заключается в необходимости получения общего стандарта алгоритмизации процесса построения компьютерной модели межмолекулярного взаимодействия наполнителя и волокнистой матрицы с выявлением характера их взаимодействия.

Методика определения количественных и качественных характеристик синтезируемого композита включает в себя разработку компьютерной модели межмолекуляр-

ного взаимодействия, например, алюминия и целлюлозы. Что имеет место, например, при напылении раскаленных металлических частиц в высокодисперсном состоянии на ткань и последующем их спекании. В результате на выходе получаем нанокomпозит на волокнистой основе, обладающий заданной отражающей способностью применительно к тепловому и ультрафиолетовому излучению, покрытие, обеспечивающее защитные свойства в условиях высоких температур.

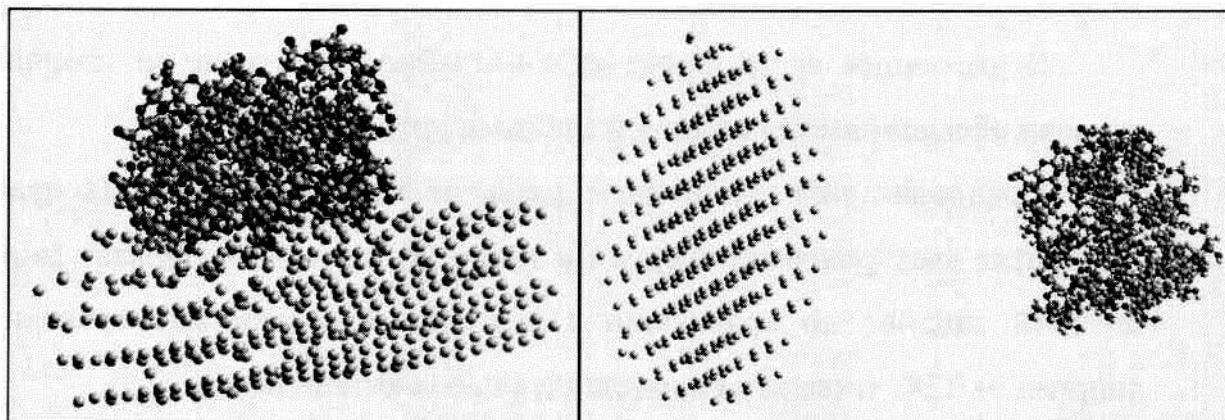
Толщина слоя алюминия, взаимодействующего с волокном целлюлозы, в поставленном нами компьютерном эксперименте, составила 4 атомарных уровня. Волокнистый материал – 6 цепочек целлюлозы, скрепленных водородными связями. В модели не учивалось присутствие примесей в материале и влажность воздуха. Подразумевалось, что взаимодействие компонентов происходило в вакууме. Наличие взаимодействия между компонентами проверялось исходя из значений энергии как отдельных компонентов, так и нанокomпозита в целом.

При межмолекулярном взаимодействии значение суммарной энергии связей нанокomпозита должно значительно отличаться от значения суммы энергий отдельных его компонентов. В качестве фактора, влияющего на силу взаимодействия компонентов, выступала усредненная величина расстояния между их микрочастицами, крайние значения которых показаны на рис.1 с расстояниями 3,5Å (а) и 50Å (б).

В табл. 1 представлены численные значения энергии исследуемой системы в зависимости от расстояния между частицами.

Т а б л и ц а 1

Энергия компонента, kcal/mol	Обозначение	Расстояние между компонентами	
		50 А	3,5 А
Алюминий	Е1	- 753,16	- 753,16
Целлюлоза	Е2	423,308	423,308
Нанокomпозит	ЕЗ	-334,14	-458,73



а)

б)

Рис. 1

Таким образом, зная расстояния между компонентами, принимая во внимание особенности технологии нанесения адгезива на волокнистую матрицу – субстрат, можно судить о потенциальной возможности их взаимодействия и получения устойчивого соединения, характеризуемого его адгезионными параметрами.

Количественной характеристикой адгезии является работа адгезии:  $W_a$  – работа, необходимая для обратимого изотермического разделения двух приведенных в контакт конденсированных фаз по площади единичного сечения [3]. Ее можно представить в следующем виде:

$$W_a = wN, \quad (1)$$

где  $w$  – средняя энергия единицы связи, обеспечивающей адгезию,  $N$  – число связей, приходящихся на единицу площади контакта адгезива и субстрата. Число  $N$  определяется площадью фактического контакта между адгезивом и субстратом, которая зависит от свойств поверхностей адгезива и субстрата: энергетических характеристик поверхностей контактирующих фаз, шероховатости поверхности субстрата, условий формирования адгезионного соединения, тепловых и механических свойств адгезива и субстрата, и пр. [3].

Для количественной оценки взаимодействия можно использовать потенциал межатомного взаимодействия Ленарда-Джонса [4]:

$$V(r) = 4\epsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6] = V_{\text{отт}} + V_{\text{прит}}. \quad (2)$$

Таким образом, из уравнения (2) следует, что сила взаимодействия между адгезивом и субстратом может быть определена как

$$F = -[\delta V(r)/\delta r]_{0i0j} = F_{\text{отт}} + F_{\text{прит}}, \quad (3)$$

а качественное соединение компонентов обеспечивается при значении силы взаимодействия между ними близким к значению межатомного взаимодействия слабейшего из компонентов.

В результате сравнения этой величины с аналогичными значениями, определяемыми применительно к чистым компонентам системы, можно судить о прочности и устойчивости соединения адгезива с субстратом как одного из конечных результатов прогнозирования физико-механических параметров синтезируемого нанокompозита применительно к технологическим условиям его получения.

## В Ы В О Д Ы

Нами разработана молекулярная модель, дающая возможность визуализации взаимодействия компонентов нанокompозиционного материала на волокнистой основе. Дальнейшее ее развитие позволит получить общий стандарт алгоритмизации процесса построения компьютерной модели межмолекулярного взаимодействия наполнителя и волокнистой матрицы, выявить характеристики взаимодействия и создать методику прогнозирования коли-

чественных и качественных показателей  
вновь синтезируемого материала.

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. *Khalatur P.G.* Computer simulations of polymer systems // *Mathematical Methods in Contemporary Chemistry*. – New York: Gordon & Breach Publishers, 1996.

2. *Allen M.P., Tidesley D.J.* Computer Simulation of Liquids. – Oxford: Clarendon Press, 1987. – Ch9. P.261.

3. *Богданова Ю.Г.* Адгезия и ее роль в обеспечении прочности полимерных материалов. – М.: МГУ им. М.В. Ломоносова.

4. *Мазалова В.Л., Кравцова А.Н., Солдатов А.В.* Нанокластеры: рентгеноспектральные исследования и компьютерное моделирование. – М.: Физматлит, 2013.

Рекомендована кафедрой наземных транспортных средств и технологических машин. Поступила .03.02.14

---