

УДК 004.0:539.2

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТРИБОМЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
НАНОКОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ
МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

**THE PREDICTION OF TRIBOMECHANICAL CHARACTERISTICS
OF NANOCOMPOSITE MATERIALS
BY MOLECULAR DYNAMICS METHODS**

П.В. КОРОЛЁВ, Е.Н. КАЛИНИН, М.А. ШИЛОВ
P.V. KOROLEV, E.N. KALININ, M.A. SHILOV

(Ивановский государственный политехнический университет,
Ивановский институт ГПС МЧС России)
(Ivanovo State Polytechnic University, Ivanovo Institute SFS EMERCOM of Russia)
E-mail: ttp@ivgpu.com

В статье представлена методика экспресс-оценки трибомеханических свойств системы с применением инструментов молекулярного моделирования.

The article presents a methodology for the rapid assessment of tribomechanical properties of the system using molecular modeling tools.

Ключевые слова: молекулярная динамика, трибология, трибомеханика, трибосистема, энергия системы.

Keywords: molecular dynamics, tribology, tribomechanics, tribosystem, energy system.

Развитие нанотехнологий и появление нового класса приборов микроэлектромеханических и наноэлектромеханических систем (МЕМС и НЕМС) привело к необходимости управления трибологическими процессами в микро- и наномасштабах [1]. Тела, взаимодействующие в таких системах, очень малы, нагрузки на трибосопряжения невелики, так что трибологические процессы в значительной степени опреде-

ляются атомно-молекулярным взаимодействием контактирующих поверхностей, в которое вовлекаются сравнительно небольшие количества атомарных слоев сопряженных тел, причем доля деформационных процессов незначительна [2].

Методы и средства классической трибологии в таких условиях неприменимы. Появилась необходимость изучения трибологических процессов при единичных

контактах; исследование процессов трения, изнашивания и смазки твердых тел на атомном и молекулярном уровне вышли на новый качественный уровень. Кроме того, разработка высокоэффективных материалов потребовала создания путей и средств к направленному модифицированию и управлению структурой поверхностных слоев деталей на наноуровне. Решение этих проблем возлагается на нанотрибологию – трибологию объектов нанометрического масштаба, включая молекулярно-гладкие поверхности. Своему появлению нанотрибология обязана развитию компьютерной техники, робототехники, микрохирургии, электромеханических гироскопов и др. Впервые название "нанотрибология" появилось в публикациях корпорации IBM в 1990 г. [3], [4]. Успех и внимание к исследованиям в нанотрибологии объясняется интенсивным развитием экспериментальной базы для исследования нанообъектов. В отличие от классической трибологии в нанотрибологии рассматривается фрикционное взаимодействие тел малой массы (порядка мкг) при малых нагрузках (порядка 10⁻⁸..10⁻⁵ Н), обеспечивающее практическую безызносность (предельные износы не более нескольких атомных слоев). Для решения этих задач создан ряд приборов – сканирующий туннельный микроскоп, атомный силовой микроскоп, аппарат для измерения поверхностных сил и т. д. – техника, которая в сочетании с компьютерным моделированием, наряду с решением специфических задач нанотрибологии, позволила сделать серьезный прорыв в наши представления о процессах трения, смазки и изнашивания твердых тел, дав, в частности, стимул к теоретическим исследованиям явлений фрикционного взаимодействия тел на атомном уровне. Такие теоретические разработки позволяют интерпретировать уже имеющиеся экспериментальные данные и могут явиться основой для построения общей теории трения.

Сопротивление трению является одним из главных трибомеханических свойств материала. Повышенная износостойкость позволяет материалу сохранять свои физико-механические свойства длительный промежуток времени [2]. Особенно важны

трибомеханические характеристики при получении материалов, используемых в спецодеждах для экстремальных условий. Разработка экспресс-методов оценки трибомеханических особенностей разрабатываемых материалов позволит значительно снизить как временные, так и материальные затраты в случаях, когда этот параметр не является основополагающим для материала [1].

В ходе исследования построена компьютерная модель трибосистемы, включающая в себя две поверхности трения и смазочный слой. Одна из поверхностей трения – фторопласт-4 (Ф-4) [5], другая – сталь. В качестве смазочных материалов исследовали воду и неионогенный ПАВ (неонол 9/6) [6]. Слои поверхностей трения располагались параллельно друг другу. Поверхности трения перемещали относительно друг друга со скоростью 10 Е/пс. Исходным было принято "зеркальное" положение слоев по отношению друг к другу. Завершением компьютерного эксперимента служило полное перемещение начальных координат одной из поверхностей трения на величину половины длины поверхности.

На рис. 1 представлены начало и окончание компьютерного эксперимента: а) – трение без смазки; б) – трение в присутствии водной смазки; в) – трение в присутствии неионогенного ПАВ неонол 9/6.

Визуальный анализ результатов моделирования позволяет оценить трибологические свойства различных смазочных материалов (пропитки). Отметим, что при использовании в качестве смазочного материала воды или при трении без смазочного материала происходит значительное разрушение стальной поверхности (окисление). При использовании неионогенного ПАВ неонол 9/6 такого эффекта не наблюдается в силу того, что данный смазочный материал образует эффективный смазочный слой. Этот факт доказан в работах [6...8]. В них показано, что в результате процесса самоорганизации в смазочном слое образуется надмолекулярная структура, позволяющая полностью разделить поверхности трения и препятствующая их разрушению.

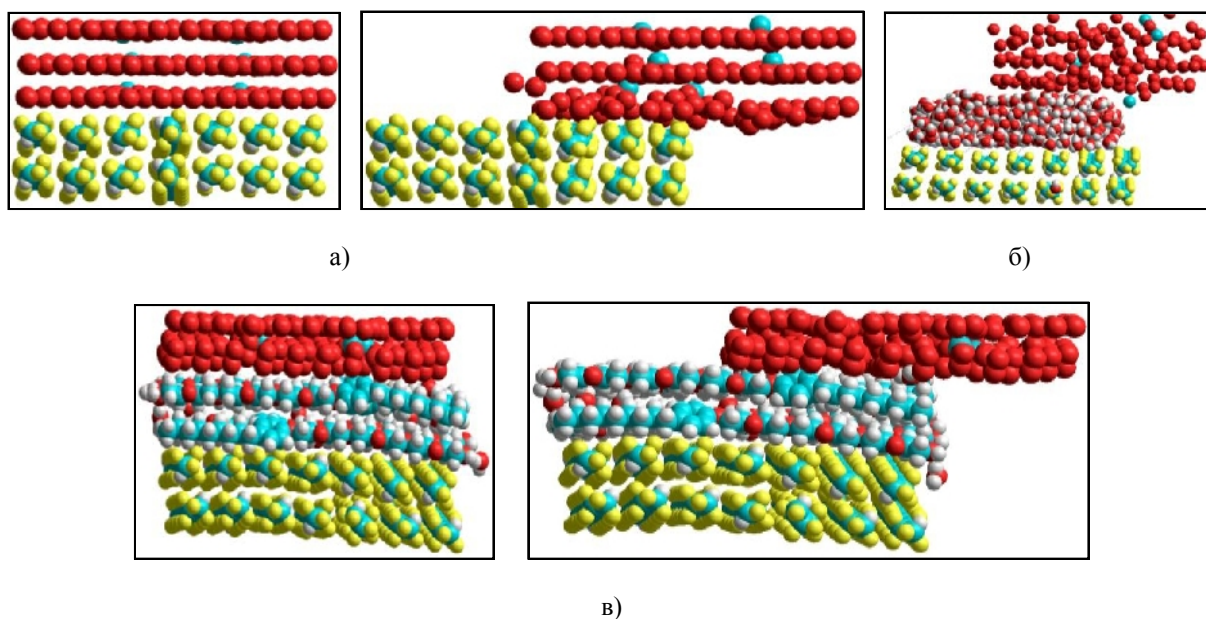


Рис. 1

Мерой прочности связи является количество энергии, затрачиваемой на ее разрыв (энергия диссоциации dE_{tot}). Методика определения количественных характеристик разрушения материала приведена в [9]. Ее возможно применять и в случае ис-

следования сопротивления трению материала. Но возможна более быстрая оценка характеристик материала с использованием величины изменения суммарной энергии системы (рис. 2 – изменение величины dE_{tot} : а) – для неолола; б) – для воды).

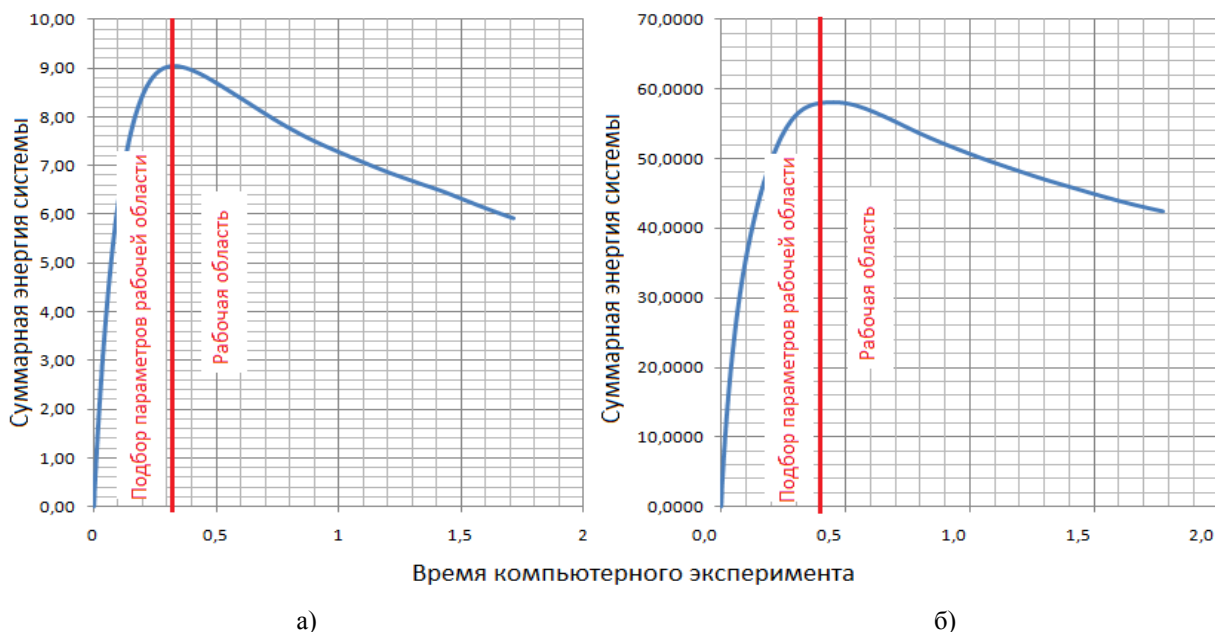


Рис. 2.

После начального периода нахождения программой рабочей области данных следует уменьшение изменения энергий (dE_{tot}), то есть чем меньше эта величина,

тем система более устойчива. С учетом того, что контактирующие поверхности одинаковы и по количественному, и по качественному составу, меньшие значения

изменения суммарной энергии соответствуют лучшим триботехническим характеристикам смазочного слоя.

ВЫВОДЫ

1. Установлено, что преимуществом данного метода перед ранее изложенным является:

– сокращение затрат машинного времени, что позволяет рекомендовать методику для скрининговых исследований;

– уменьшение количества входных параметров, что снижает случайностную и систематическую погрешность исследований.

2. Таким образом, разработка и внедрение представленной методики анализа позволяет быстро и наглядно прогнозировать трибомеханические свойства различных материалов, используя методы молекулярной динамики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Современная трибология: Итоги и перспективы (под общ. ред. акад. К.В. Фролова). – М.: Издательство ЛКИ, 2008.

2. Машков Ю.К., Овчар З.Н., Байбарацкая М.Ю., Мамаев О.А. Полимерные композиционные

материалы в триботехнике. – М.: ООО "Недра-Бизнесцентр", 2004.

3. Neubauer G., Cohen S.R., McClelland G.M., Horne D., Mate C.M. Force microscopy with a bi-directional capacitance sensor // Review of Scientific Instruments. – Vol. 61. Issue 9, 1990. P.2296...2308.

4. Левченко В.А., Буяновский И.А., Матвеев В.Н. Этапы развития нанотрибологии // Проблемы машиностроения и надежности машин. – 2005, №2. С.36...45.

5. Шилов М.А. Смазочное действие водных растворов неионогенных ПАВ при трении пары металл – полимер: Дис. канд. техн. наук. – Иваново, 2011.

6. Шилов М.А. Исследования механизма самоорганизации неионогенных ПАВ и их композиции с ионогенными ПАВ в водосмазываемых узлах трения // Жидкие кристаллы и их практическое использование. – 2011. Вып. 1 (35). С.57...64.

7. Шилов М.А. О Возможности компьютерного моделирования смазочного слоя // Технология машиностроения. – 2009, №11 (89). С. 51...55.

8. Шилов М.А., Годлевский В.А., Березина Е.В. и др. Применение метода компьютерного молекулярного моделирования для описания строения смазочного слоя // Трение и износ. – 2009. Т. 30. № 1. С.16...21.

9. Королев П.В., Калинин Е.Н., Шилов М.А. Визуализация процесса взаимодействия компонентов нанокompозита методами молекулярного моделирования // Изв. вузов. Технология текстильной промышленности. – 2014, №2. С.148...151.

Рекомендована кафедрой наземных транспортных средств и технологических машин ИВГПУ. Поступила 02.12.14.