

УДК 531.43
DOI 10.47367/0021-3497_2022_5_190

**РЕЗУЛЬТАТЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ТРИБОТЕХНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
НЕИОНОГЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ***

**RESULTS OF MOLECULAR MODELING
OF TRIBOTECHNICAL PROPERTIES OF NONIONIC SURFACTANTS**

*О.В. БЛИНОВ, Е.Н. КАЛИНИН, В.Б. КУЗНЕЦОВ,
Е.Н. НИКИФОРОВА, С.А. НЕФЁДОВ*

*O.V. BLINOV, E.N. KALININ, V.B. KUZNETSOV,
E.N. NIKIFOROVA, S.A. NEFYODOV*

**(Ивановский государственный энергетический университет,
Ивановский государственный политехнический университет,
Ивановский государственный университет)**

**(Ivanovo State Power Engineering University,
Ivanovo State Polytechnical University,
Ivanovo State University)**

E-mail: Oleg_blinov@ro.ru

В работе исследованы взаимозависимости энергетических показателей неионогенных поверхностно-активных веществ, полученных методом молекулярно-динамического моделирования, и коэффициентов трения хлопчатобумажной ткани.

In this paper, the interdependence of the energy indicators of nonionic surfactants obtained by the method of molecular dynamics modeling and the coefficients of cotton fabrics friction has been studied.

* Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ по проекту 20-43-370007 р_a_ Ивановская область: "Развитие научных основ прогнозирования функциональных и конструкционных параметров синтезируемых полимерных волокнистых композитных систем".

Ключевые слова: триботехнические свойства, неионогенные поверхностно-активные вещества, молекулярно-динамическое моделирование, энергетические характеристики ПАВ, хлопчатобумажная ткань, коэффициент трения.

Keywords: tribotechnical properties, nonionic surfactants, molecular dynamics modeling, energy characteristics of surfactants, cotton fabric, coefficient of friction.

Ранее [1...4] исследованы триботехнические свойства текстильных материалов, отличающихся переплетением и образованных нитями, с различными физико-механическими характеристиками. Оценивалось изменение показателей коэффициента трения ткани полотняного переплетения в сухом состоянии, с пропиткой водными растворами неионогенных поверхностно-активных веществ (ПАВ).

В настоящей работе проведены теоретические исследования энергетических характеристик неионогенных поверхностно-активных веществ в паре трения "металл – металл" и сопоставление полученных данных с экспериментальными результатами изменения коэффициента трения текстильных материалов, полученными на разработанном лабораторном стенде.

Перспективным направлением в решении задач прогнозирования свойств вновь синтезируемых материалов являются методы молекулярно-динамического моделирования, которые используются в компьютерной химии, вычислительной биологии и науке о материалах для изучения как индивидуальных молекул, так и взаимодействия в молекулярных системах [5...7]. Общей чертой методов молекулярного моделирования является атомистический уровень описания молекулярных систем. Материал на молекулярном уровне представляет совокупность атомов, химически связанных между собой. Мерой устойчивости межмолекулярных связей служит количество энергии, затрачиваемой на их разрыв, а одним из факторов, влияющих на это, является коэффициент трения и структура взаимодействующих поверхностей.

Одним из вариантов исследования энергетических характеристик триботехнических

показателей исследуемой системы являются программы молекулярно-динамического моделирования, например, Hyper Chem, реализующие методы молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии [8].

Численный анализ проведен средствами системы автоматизированного расчета [9] энергетических характеристик молекулярной структуры смазочного слоя при циклическом перемещении поверхности трения, с использованием методов молекулярной динамики, заложенных в CAD/CAI Hyper Chem.

Для определения энергетических показателей был выбран ряд неионогенных поверхностно-активных веществ, используемых в различных технологических операциях отделки ткани. Водные растворы некоторых из поверхностно-активных веществ различной концентрации были использованы для определения триботехнических показателей в паре трения "транспортирующий ролик – текстильный материал" [4], [10].

В табл. 1 представлены результаты молекулярно-динамического моделирования энергетических характеристик поверхностно-активных веществ с использованием программы Hyper Chem, а также определенные их физико-химические показатели. Приведенные результаты физического эксперимента свидетельствуют о том, что энергия адсорбции изменяется в гораздо более широких пределах, нежели энергия сдвиговых деформаций. В первом случае разница между минимальным и максимальным значениями составляет два порядка. Во втором – всего 800 единиц: на диаграмме рис.1-а,б представлены данные по энергии адсорбции ($E_{ад}$), и энергии

сдвига ($E_{сд}$) в паре трения "металл – металл" поверхностно-активных веществ и расположенные по мере ее возрастания, что об-

легчает их визуальную оценку в зависимости от марки вещества.

Таблица 1

Поверхностно-активное вещество	Энергетические и физико-химические характеристики			
	энергия адсорбции, ккал/моль	энергия сдвига, ккал/моль	плотность, г/м ³	молекулярная масса
ОП-7	133	7145	1,030	470...542
Стеарокс-6	323	7139	1,086	512
ОС-20	5373	7628	0,70...0,80	1150
Синтанол ДТ-7	13090	7244	0,95	465...508
Синтанол ДС-10	7771	7383	0,95	510...673
Синтанол БВ	3664	7135	0,95	726...754
Феноксол 9/10 БВ	5104	6981	1,066	696
Синтамид 10	974	7137	1,010	669...754
ОП-10	900	7138	1,060	646...753

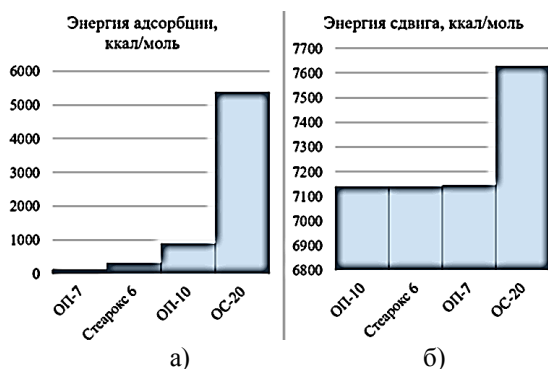


Рис. 1

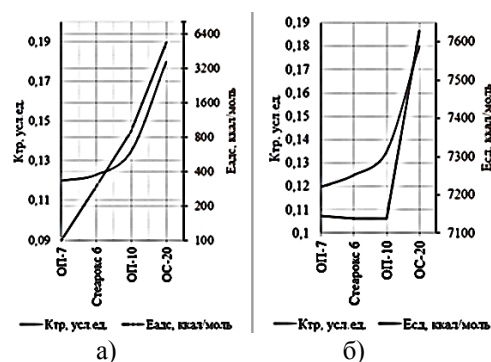


Рис. 2

В явном виде проследить зависимость энергетических показателей от физико-химических характеристик поверхностно-активных веществ не представляется возможным. Поэтому целесообразно рассмотреть их взаимозависимость от экспериментально полученных результатов анализа по коэффициенту трения и энергии адсорбции (а), и энергии сдвига (б) с транспортирующим роликом технологической машины и хлопчатобумажной ткани Рогожка, для четырех исследованных веществ: ОП-7, ОП-10, Стеарокс-6 и ОС-20, которые представлены на рис.2. Данные по величине коэффициента трения получены при концентрации ПАВ – 2 г/л [4], [10].

Представленные графические зависимости свидетельствуют о том, что полученные расчетные значения энергии адсорбции и энергии сдвига для четырех выбранных неионогенных поверхностно-активных веществ имеют характер, аналогичный изменению коэффициентов трения, полученных

экспериментальным путем для группы данных ПАВ. Так, если величина коэффициента трения возрастает при переходе от ОП-7 к ОС-20 в 1,5 раза, величина энергии адсорбции увеличивается примерно в 40 раз, а энергии сдвига – в 1,1 раза. Следовательно, увеличение энергии адсорбции и энергии сдвига свидетельствуют о характере изменений поверхностных триботехнических свойств хлопчатобумажной ткани при движении в растворе синтетических поверхностно-активных веществ по стальным транспортирующим органам технологической машины.

ВЫВОДЫ

1. Определены численные значения энергетических показателей ряда неионогенных поверхностно-активных веществ в паре трения "хлопчатобумажная ткань – металл" средствами специально разработанной нами программы для ЭВМ и программного комплекса Hyper Chem.

2. Проведены корреляция расчетных показателей энергии адсорбции и энергии сдвига с экспериментальными данным по коэффициенту трения ткани "Рогожка" применительно к использованным поверхностно-активным веществам.

3. Установлено, что расчетные энергетические показатели могут служить основой для прогнозирования качественных показателей технологических процессов обработки текстильной структуры с ее триботехническими характеристиками, определяемыми взаимодействием с металлическим технологическим объектом.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Годлевский В.А., Блинов О.В., Калинин Е.Н., Кузнецов В.Б., Митронов Д.В.* Исследование триботехнических свойств текстильных материалов на трибометре ТАУ-1. Надежность и долговечность машин и механизмов // Сб. мат. X Всероссийск. научн.-практ. конф. ФГБОУ ВО Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России. – Иваново, 2019. С.258...262.

2. *Годлевский В.А., Блинов О.В., Калинин Е.Н., Кузнецов В.Б., Митронов Д.В.* Исследование триботехнических свойств поверхностей текстильных материалов. Надежность и долговечность машин и механизмов // Сб. мат. XI Всероссийск. научн.-практ. конф. ФГБОУ ВО Ивановская пожарно-спасательная академия ГПС МЧС России. – Иваново, 2020. С. 393...397.

3. *Годлевский В.А., Кузнецов В.Б., Блинов О.В., Калинин Е.Н.* Экспресс-метод анализа триботехнических свойств текстильной структуры полимерного наполнителя с учетом факторов внешнего воздействия. Физика волокнистых материалов: структура, свойства, наукоемкие технологии и материалы (smartex). Учредители: Ивановский государственный политехнический университет (Иваново) ISSN: 2413-6514. 2020 (№1). С. 35...40.

4. *Блинов О.В., Калинин Е.Н., Кузнецов В.Б.* Исследования триботехнических свойств тканей в водных растворах неионогенных поверхностно-активных веществ. SMARTEX. – Иваново, 2021. С.117...120

5. *Годлевский В.А., Фомичёв Д.С., Шилов М.А. и др.* Применение метода компьютерного молекулярного моделирования для описания строения смазочного слоя // Трение и износ. – Гомель: Беларусь, 2009. С.16...21.

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

7. *Березина Е.В., Годлевский В.А., Калинин Е.Н., Королёв П.В.* Концептуальные возможности метода

молекулярной динамики для моделирования межмолекулярного взаимодействия в наноконпозиционных системах // Вестник научно-промышленного общества – М.: "Алев-В", 2013, вып. 20.

8. *Фомичев В.Т., Глазунов А.В.*, Математическое моделирование динамики однорольковой зоны транспортирования ткани с учетом сил трения // Изв.вузов. Технология текстильной промышленности. – 2003, №1. С.119...122.

9. *Блинов О.В., Годлевский В. А.* Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ: № 2016662003, 2016.

10. *Блинов О.В., Калинин Е.Н., Кузнецов В.Б.* Влияние растворов поверхностно-активных веществ на триботехнические свойства текстильных материалов в паре трения "ткань – транспортирующий ролик // Изв.вузов. Технология текстильной промышленности. – 2022, №2. С.233...237.

REFERENCES

1. *Godlevsky V.A., Blinov O.V., Kalinin E.N., Kuznetsov V.B., Mitronov D.V.* Study of the tribological properties of textile materials on the TAU-1 tribometer. Reliability and durability of machines and mechanisms: collection of materials of the X All-Russian Scientific and Practical Conference. FGBOU VO Ivanovo Fire and Rescue Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia. – Ivanovo, 2019. P. 258...262.

2. *Godlevsky V.A., Blinov O.V., Kalinin E.N., Kuznetsov V.B., Mitronov D.V.* Study of tribological properties of surfaces of textile materials. Reliability and durability of machines and mechanisms: collection of materials of the XI All-Russian Scientific and Practical Conference. FGBOU VO Ivanovo Fire and Rescue Academy of the State Fire Service of the Ministry of Emergency Situations of Russia. – Ivanovo, 2020. P.393...397.

3. *Godlevsky V.A., Kuznetsov V.B., Blinov O.V., Kalinin E.N.* Express method for analyzing the tribological properties of the textile structure of a polymer filler, taking into account external influence factors. physics of fibrous materials: structure, properties, high technologies and materials (smartex). Founders: Ivanovo State Polytechnic University (Ivanovo) ISSN: 2413-6514. 2020 (No. 1). P. 35...40.

4. *Blinov O.V., Kalinin E.N., Kuznetsov V.B.* Studies of tribological properties of fabrics in aqueous solutions of nonionic surfactants. SMARTEX. – Ivanovo, 2021. P. 117...120

5. *Godlevsky, V.A.* Application of the method of computer molecular modeling to describe the structure of the lubricating layer / V.A. Godlevsky, D.S. Fomichev, M.A. Shilov [et al.] // Friction and wear. – Gornel: Belarus, 2009. P.16...21.

6. *Mazalova V.L., Kravtsova A.N., Soldatov A.V.* Nanoclusters: X-ray spectral studies and computer simulation. – М.: FIZMATLIT, 2013. .

7. *Berezina E.V., Godlevsky V.A., Kalinin E.N., Korolev P.V.* Conceptual possibilities of the molecular

dynamics method for modeling intermolecular interactions in nanocomposite systems // Bulletin of the scientific and industrial society – M.: "Alev-V", 2013, is. 20.

8. Fomichev V.T., Glazunov A.V., Mathematical modeling of the dynamics of a single-roller zone of tissue transportation, taking into account friction forces // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Seriya Tekhnologiya Tekstil'noi Promyshlennosti. – 2003, № 1. P. 119...122.

9. Blinov O.V., Godlevsky V.A. Certificate of state registration of the computer program: No. 2016662003, 2016

10. Blinov O.V., Kalinin E.N., Kuznetsov V.B. Influence of surfactant solutions on the tribological properties of textile materials in a friction pair "fabric – transport roller // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Seriya Tekhnologiya Tekstil'noi Promyshlennosti. – 2022, №2. P.233...237.

Рекомендована кафедрой мехатроники и радиоэлектроники ИВГПУ. Поступила 04.10.22.
