

УДК 531.43

DOI 10.47367/0021-3497_2025_1_158

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИБОТЕХНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ГРАНИЧНОГО СМАЗОЧНОГО СЛОЯ НЕИОНОГЕННЫХ ПАВ
ПРИ ТРЕНИИ ПОВЕРХНОСТЕЙ ВОЛОКНИСТЫЙ МАТЕРИАЛ/МЕТАЛЛ
И МЕТАЛЛ/МЕТАЛЛ**

**STUDY OF TRIBOTECHNICAL CHARACTERISTICS
OF BOUNDARY LUBRICANT LAYER OF NON-IONOGENIC SURFACTANTS
DURING FRICTION OF FIBROUS MATERIAL/METAL
AND METAL/METAL SURFACES**

О.В. БЛИНОВ¹, В.Б. КУЗНЕЦОВ², В.А. ГОДЛЕВСКИЙ³, Е.Н. КАЛИНИН², А.В. БАРАНОВ²

O.V. BLINOV¹, V.B. KUZNETSOV², V.A. GODLEVSKY³, E.N. KALININ², A.V. BARANOV²

¹Ивановский государственный энергетический университет,

²Ивановский государственный политехнический университет,

³Ивановский государственный университет)

(¹Ivanovo State Power Engineering University,

²Ivanovo State Polytechnic University,

³Ivanovo State University)

E-mail: enkalini@gmail.com

В работе описаны процедура и результаты молекулярного моделирования трибосистем «металл – волокнистая поверхность – раствор ПАВ» и «металл – металл – раствор ПАВ», которые могут служить основой для прогнозирования показателей технологических процессов обработки тек-

стильной структуры. Приведены результаты расчета множественной корреляции данных, полученных при моделировании, расчете и экспериментальном исследовании триботехнических свойств водных растворов неионогенных ПАВ, взаимодействующих с поверхностями трения волокнистых и металлических материалов. Полученные результаты показывают, что наиболее сильные связи с коэффициентом трения образуют следующие характеристики НПАВ: плотность, краевой угол смачивания, гидрофильно-липофильный баланс, полная энергия системы после сдвига поверхности. Аналогичные результаты наблюдаются при расчете корреляционной зависимости этих характеристик от коэффициента трения, полученного при исследовании трибосистемы Ткань-ПАВ-Металл.

The paper describes the procedures and results of molecular modeling of the tribosystem "metal - fibrous surface - surfactant solution" and "metal - metal - surfactant solution", which can be used to predict the performance of technological processes for processing textile structures. The results of calculating the multiple dependence of the data obtained in modeling, calculating and experimentally conducting the tribological properties of aqueous solutions of non-ionic surfactants interacting with the friction surfaces of fibrous and metallic materials are presented. The results show that the strongest relationship with the friction coefficient takes into account the following characteristics of non-ionic surfactants: surface, contact angle, hydrophilic-lipophilic balance, and the full energy system after surface shear. Similar results are observed when calculating the dependence on the friction coefficient obtained when conducting the tribosystem of the Fabric-Surfactant-Metal system.

Ключевые слова: триботехнические свойства, неионогенные поверхностно-активные вещества, физико-химические характеристики НПАВ, критическая концентрация мицеллообразования, гидрофильно-липофильный баланс.

Keywords: tribological properties, non-ionic surfactants, modeling, experiment, physicochemical characteristics of NIS, surface tension, critical micelle concentration, hydrophilic-lipophilic balance, cotton fabric, friction coefficient.

Распространенным видом трения в рабочих узлах текстильных машин является процесс фрикционного взаимодействия волокнистой поверхности (ткани) с металлическим контртелом. При этом смазочной средой в таких трибосистемах часто являются растворы поверхностно-активных веществ (ПАВ). Тогда объектом изучения могут служить такие характеристики контактного взаимодействия, как скорость пропитки, интенсивность промывки, модификация структуры волокон, а также коэффициент трения и интенсивность изнашивания поверхностей. Эти параметры, безусловно, связаны с режимом трения, молекулярной структурой используемого ПАВ.

С целью оценки степени влияния свойств ПАВ на трибологические характеристики трибосистемы проведено моделирование молекулярной структуры граничного смазочного слоя во взаимодействии с поверхностями трения с использованием методов молекулярной динамики. Для моделирования трибоактивного компонента выбраны марки водорастворимых неионогенных ПАВ: Стеарокс 6, ОП-7, ОП-10, ОС-20 (концентрация 2,0 г/л), имеющие различную химическую структуру и параметры поверхностной активности, а также вспомогательные вещества глицерин и натрия тетраборат (раствор в глицерине 20%). Тетраборат натрия и глицерин так-

же, как и ПАВ, в том числе и неионогенные, входят в группу текстильных вспомогательных веществ и используются индивидуально или в комбинации с ПАВ. Так, тетрабораты применяются в составе композиций в процессах беления тканей. Глицерин в составе композиций с ПАВ используется для создания устойчивых дисперсий водонерастворимых красителей при колорировании тканей.

Наряду с методикой компьютерного расчета был поставлен натурный эксперимент по испытанию исследуемой пары трения. Для пары «ткань – металл» использовалась хлопчатобумажная ткань «рогожка» и металлическая поверхность, вращающаяся с постоянной скоростью (схема трения «плоскость – ролик»). Испытания пары трения «металл – металл» происходили по той же контактной схеме.

Исследование проводилось с помощью установки, имитирующей процесс взаимодействия в паре трения «текстильный материал – металлическая поверхность», «металлическая поверхность – металлическая поверхность» и позволяющей определять изменение потребляемой электродвигателем мощности при трении, снимать данные с тензометрического силоизмерителя и установленного в зоне трения датчика температуры. При этом в зону контакта дозированно вносилось исследуемое вещество. В работе использовалась схема трения «диск (металл) – плоскость (ткань, пряжа)» и «диск (металл) – плоскость (металл)». Режим трения в эксперименте принимали постоянным при следующих параметрах: трение непрерывное при нагрузке 1 Н, площадь контакта 2 мм², частота вращения диска 1000 об/мин.

При компьютерном моделировании и теоретическом прогнозировании трибологических свойств избранной трибосистемы применен разработанный ранее способ оценки эффективности смазочных материалов, основанный на использовании модели пары трения в присутствии граничного смазочного слоя между ними [1]. Для этих целей использовали программное обеспечение [2, 3], предназначенное для оценки эффек-

тивности смазочных материалов с помощью программных средств, реализующих методы молекулярной механики, квантовой химии и молекулярной динамики (например, Nureg-Chem), применяя при этом протоколы межпрограммной связи или внутренние языки программирования.

При проведении компьютерного моделирования использовались две модели. В первой модели при моделировании граничного смазочного слоя использовались только молекулы исследуемых веществ (ПАВ), во второй модели к молекулам вещества добавлялись молекулы воды так, чтобы молекулярная масса молекул вещества была равна общей молекулярной массе молекул воды. Это необходимо для того, чтобы учесть неизбежное влияние процесса гидратации растворенных молекул ПАВ на процесс самоорганизации молекулярной структуры трибоактивного компонента в смазочном слое.

Алгоритм для исследования трибосистемы состоял из следующих шагов:

1. С помощью программного обеспечения [2, 3] и программы молекулярного моделирования NuregChem, реализующей расчетные методы молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии, первоначально была смоделирована одна молекула смазочного слоя. При дальнейшем использовании методов молекулярной механики для расчета параметров (энергетических, геометрических характеристик и т. д.) триботехнической системы выполнялась оптимизация модели молекулы полуэмпирическими методами *zindo/1* (для расчета зарядов атомов молекул). Метод *zindo/1* входит в семейство методов SCF и является одним из вариантов метода INDO [4, 5, 6, 7, 8].

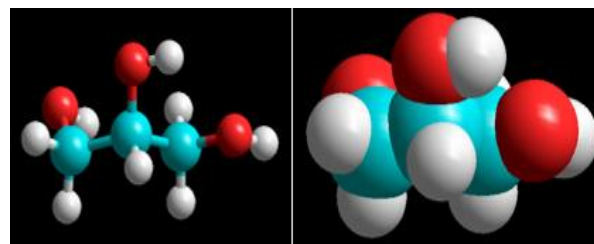


Рис. 1

2. С помощью разработанного программного обеспечения [2] посредством использования протоколов межпрограммной связи для управления HyperChem создавался

$$N_{\text{molecules}} = (\text{volume} \times \text{density} \times \text{Avogadro's number}) / \text{molecular weight},$$

где *volume* – объемный размер слоя (задается пользователем (по умолчанию 15*15*15 Å (Ангстрем)); *density* – плотность вещества (задается пользователем), г/см³; *Avogadro's number* – число Авогадро; *molecular weight (mas_one_mol)* – молярная масса элемента (расчет производится программой на основании данных *hin* файла), г/моль.

смазочный слой заданного размера с рандомизированным расположением молекул ПАВ. При этом количество молекул рассчитывалось следующим образом [4]:

3. Выполнялась процедура минимизации энергии системы и оптимизации положения молекул в смазочном слое с использованием метода Полака-Рибьера-Поляка (PRP), определяющегося как метод сопряженных градиентов для решения нелинейных задач оптимизации [6]. Пример построенной программой трехмерной модели молекулярного кластера, образованной молекулами ПАВ, показан на рис. 2.

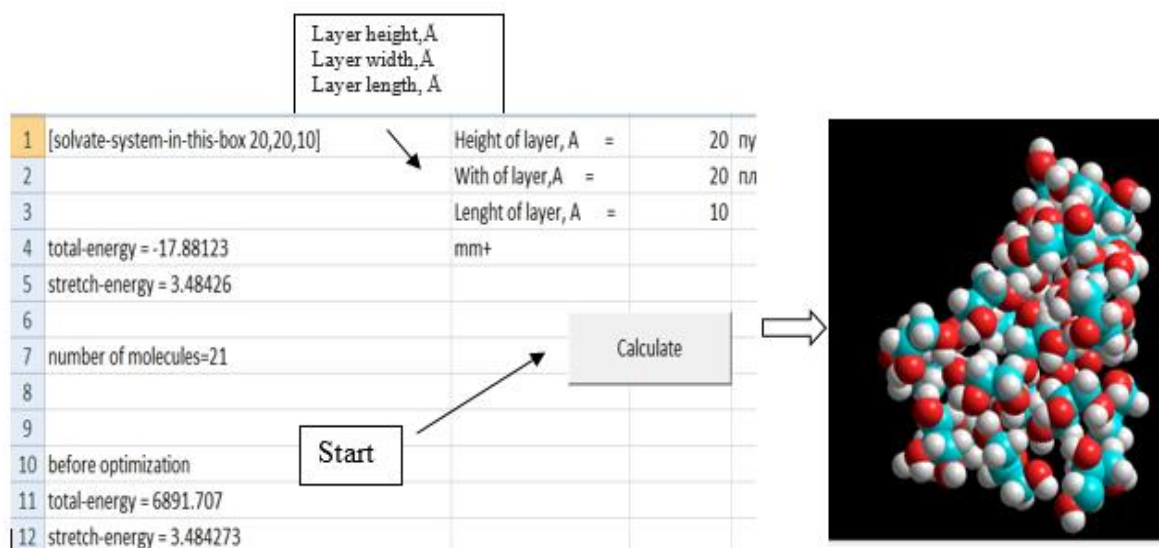


Рис. 2

4. Генерировались в виде идеальной слоевой кристаллической решетки поверхности трения заданного размера, между которыми располагался слой смазочного материала. После этого определяли межфазную поверхностную энергию в виде разницы энергий системы до взаимодействия смазочного слоя с поверхностью трения и после взаимодействия в результате произведенной оптимизации системы (рис. 3). Полученное значение являлось расчетной оценкой энергии адсорбции, представленной в столбце 2 табл. 1.

5. Посредством HyperChem осуществлялся виртуальный сдвиг с постоянной скоростью верхней поверхности трения относительно нижней. В процессе моделирования, используя методы молекулярной динамики, интегрированные в программу HyperChem, включающие как полуэмпирические квантовые, так и методы молекулярной механики [4], выполнили расчет энергетических параметров системы и определили полную энергию молекулярной системы. Полученные значения приведены в столбцах 3 и 4 табл. 1.

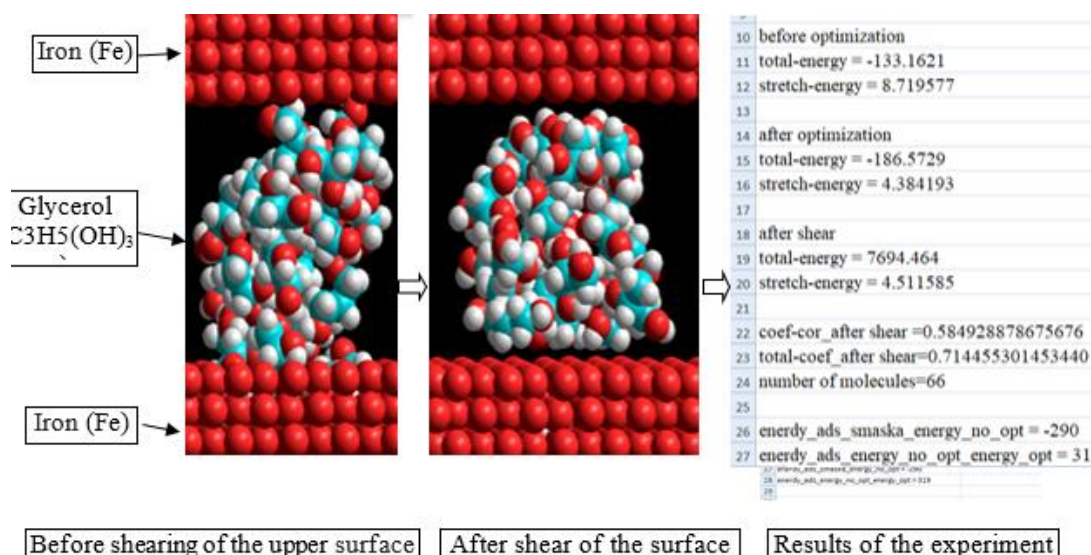


Рис. 3

С учетом ориентации продольных осей молекул относительно поверхностей трения рассчитан ориентационный коэффициент или параметр порядка (характеристика упорядоченности молекул в смазочном слое):

$$S = \frac{\delta(\cos\alpha) + \delta(\cos\beta) + \delta(\cos\gamma)}{3}, \quad (1)$$

где $\delta(\cos\alpha)$ – среднеквадратичное отклонение направляющих косинусов векторов всех молекул смазочного слоя относительно оси X; $\delta(\cos\beta)$ – среднеквадратичное отклонение направляющих косинусов векторов всех молекул смазочного слоя относительно оси Y; $\delta(\cos\gamma)$ – среднеквадратичное отклонение направляющих косинусов векторов всех молекул смазочного слоя относительно оси Z.

При этом параметр порядка для раздельной оценки по избранным пространственным направлениям рассчитывается по формулам:

$$S_x = \frac{1}{2} \langle (3 \cos^2 \theta_x - 1) \rangle, \quad (2)$$

$$S_y = \frac{1}{2} \langle (3 \cos^2 \theta_y - 1) \rangle, \quad (3)$$

$$S_z = \frac{1}{2} \langle (3 \cos^2 \theta_z - 1) \rangle. \quad (4)$$

Эти выражения получены по формуле расчета параметра порядка, введенной В.И. Цветковым [9]:

$$S = \frac{1}{2} \langle (3 \cos^2 \theta - 1) \rangle, \quad (5)$$

где θ – угол между осью индивидуальной молекулы и заданной осью X, Y, Z (угловые скобки означают усреднение по всем ориентациям молекул).

Все вышеуказанные шаги, начиная с построения рандомизированного смазочного слоя, осуществляются с помощью управляющей программы путем использования в ней OLE или DDE технологий, достигая, таким образом, автоматизации вычислений. На рис. 4 приведены модели молекул ПАВ, использованных в экспериментальных исследованиях.

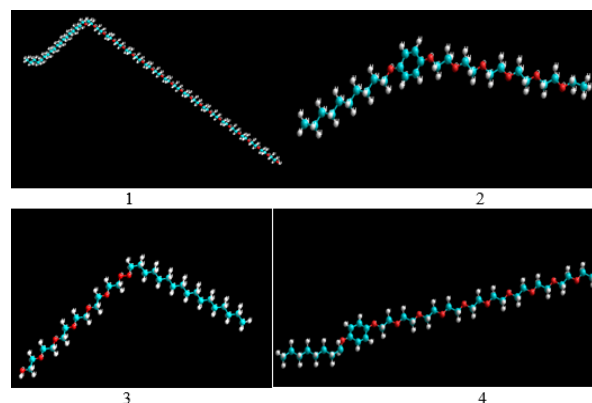


Рис. 4

В результате проведенных модельных построений и расчетов, а также натуральных экспериментов с различными НПАВ найдены физико-химические величины, потенциально влияющие на трибологические свойства исследуемых веществ. При этом часть параметров, таких как краевой угол смачивания, поверхностное натяжение,

плотность, измерена стандартными методами (метод лежащей капли, метод отрыва проволочного контура, метод гидростатического взвешивания). Значения гидрофильно-липофильного баланса (ГЛБ) взяты из справочника [10]. Полученные данные приведены в табл. 1.

Таблица 1

Вещество	Энергия адсорбции, ккал/моль	Полная энергия системы сдвига поверхности, ккал/моль	Ориентационный коэффициент	Молекулярная масса (ММ), а.е.м	ГЛБ	Краевой угол смачивания	Пов. натяж., ж/г, мН/м	Плотность раствора, г/см ³	Коэффициент трения μ	
									(металл-металл)	(ткань-металл)
ОП-7	3.93	7060	0.77	499	10.9	24	34.8	0.99	0.166	0.227
Стеарокс-6	2720	6948	0.71	549	6.8	44.5	44	1	0.139	0.348
ОС-20	60.76	7057	0.68	1152	13.5	13.9	36.3	1.03	0.134	0.325
ОП10	2151	7131	0.85	661	15.9	26.4	38	1	0.141	0.24
Вода	11	6630	0.61	18		44.9	70	0.997	0.16	0.244
Глицерин	30	6747	0.74	92	3.9	84.5	66.4	1.23	0.36	0.4
Натрия тетраборат	1205	9585.2	0.68	347		89.4	60	1.73	0.5	0.57

Для исследования степени взаимного влияния параметров выполнен корреляционный анализ полученных данных. Представленные в табл. 2, 3 результаты анализа свидетельствуют, что наиболее сильные связи с коэффициентом трения образуют следующие параметры НПАВ: плотность, краевой угол смачивания, гидрофильно-

липофильный баланс, полная энергия системы после сдвига поверхности.

Аналогичные взаимосвязи наблюдаются при расчете корреляционной зависимости этих параметров от коэффициента трения, полученного при исследовании системы Ткань-ПАВ-Металл. Данные приведены в табл. 3.

Таблица 2

	Энергия адсорбции, ккал/моль	Полная энергия системы после сдвига поверхности, ккал/моль	Ориентационный коэффициент	Молекулярная масса (ММ), а.е.м	ГЛБ	Краевой угол смачивания	Поверхностное натяжение, ж/г, мН/м	Плотность раствора, г/см ³	Коэффициент трения μ (металл-ПАВ-металл)
Энергия адсорбции, ккал/моль	1.00								
Полная энергия системы после сдвига поверхности, ккал/моль	0.19	1.00							
Ориентационный коэффициент	0.38	-0.11	1.00						

Молекулярная масса (ММ), а.е.м	0.18	0.00	0.26	1.00					
ГЛБ	0.12	0.94	0.43	0.74	1.00				
Краевой угол смачивания	0.00	0.53	-0.23	-0.68	-0.86	1.00			
Поверхностное натяжение, ж/г, Дж/м ²	-0.26	0.24	-0.58	-0.82	-0.81	0.81	1.00		
Плотность раствора, г/см ³	0.01	0.91	-0.21	-0.25	-0.68	0.80	0.53	1.00	
Коэффициент трения μ (металл-ПАВ-металл)	-0.11	0.77	-0.16	-0.43	-0.73	0.91	0.64	0.96	1.00

Таблица 3

	Энергия адсорбции, ккал/моль	Полная энергия системы после сдвига поверхности, ккал/моль	Ориентационный коэффициент	Молекулярная масса (ММ), а.е.м	ГЛБ	Краевой угол смачивания	Поверхностное натяжение, ж/г, мН/м	Плотность раствора, г/см ³	Коэффициент трения μ (ткань-ПАВ-металл)
Энергия адсорбции, ккал/моль	1.00								
Полная энергия системы после сдвига поверхности, ккал/моль	0.19	1.00							
Ориентационный коэффициент	0.38	-0.11	1.00						
Молекулярная масса (ММ), а.е.м	0.18	0.00	0.26	1.00					
ГЛБ	0.12	0.94	0.43	0.74	1.00				
Краевой угол смачивания	0.00	0.53	-0.23	-0.68	-0.86	1.00			
Поверхностное натяжение, ж/г, Дж/м ²	-0.28	0.12	-0.57	-0.84	-0.81	0.77	1.00		
Плотность раствора, г/см ³	0.01	0.91	-0.21	-0.25	-0.68	0.80	0.44	1.00	
Коэффициент трения μ (металл-ПАВ-металл)	0.13	0.81	-0.28	-0.14	-0.77	0.80	0.40	0.93	1.00

ВЫВОДЫ

1. Расчетные энергетические показатели, получаемые в результате молекулярного моделирования трибосистемы со смазочным слоем, могут служить основой для

прогнозирования показателей технологических процессов обработки текстильной структуры, вступающей во фрикционное взаимодействие с металлическими компонентами технологического оборудования.

2. Результаты расчета множественной корреляции расчетных и экспериментальных данных показывают, что наиболее сильные связи с коэффициентом трения образуют следующие характеристики НПАВ: плотность, краевой угол смачивания, гидрофильно-липофильный баланс, полная энергия системы после сдвига поверхности. Аналогичные результаты наблюдаются при расчете корреляционной зависимости указанных параметров от коэффициента трения, полученного при исследовании трибосистемы Ткань-ПАВ-Металл. Таким образом, разработанное нами программное обеспечение [2, 3], предназначенное для оценки эффективности смазочных материалов в паре трения «металл-металл», в приближенном допущении обладает предсказательной способностью и для оценки фрикционных свойств пары трения трибосистем Ткань-ПАВ-Металл.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пат. РФ 2646796 G01N3/56 07.03. Способ оценки эффективности смазочных материалов.
2. *Блинов О.В., Годлевский В.А.* Программа построения виртуальной трибосистемы со смазочным слоем: свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2016611598 от 26.05.2016.
3. *Блинов О.В., Годлевский В.А.* Программа для оценки эффективности смазочных материалов: свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2016662002 от 27.10.2016.
4. HyperChem® Release 7 for Windows® Getting Started, 2002. 339 с.
5. *Аникин А.С., Большакова О.А., Гасникова А.В. и др.* Алгоритмы локальной минимизации силового поля для трехмерного представления макромолекул // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2019.Т. 59, № 12.С. 2060...2076.
6. A q-Polak–Ribière–Polyak conjugate gradient algorithm for unconstrained optimization problems / Shashi Kant Mishra, Suvra Kanti Chakraborty, Mohammad EsmaelSamei // Journal of Inequalities and Applications. 2021. № 25.
7. *Голубев В.К.* Рассмотрение возможности использования методов полуэмпирического расчета для построения и определения свойств кластеров мета. – <https://sci-article.ru/stat.php?i=1610303645>.
8. *Marx D., Hutter J.* Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation // Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, J. Groten-dorst (Ed.), NIC Series. 2000. Vol. 1. Pp. 301...449.
9. *Веденов А.А.* Физика растворов. М.: Наука, 1984. 108 с.

10. Поверхностные явления и поверхностно-активные вещества: справочник / под ред. А.А. Абрамзона и Е.Д. Щукина. Л.: Химия, 1984. 392 с.

11. *Филичев В.Т., Глазунов А.В.* Математическое моделирование динамики одноролковой зоны транспортирования ткани с учетом сил трения // Известия высших учебных заведений. Технология текстильной промышленности. 2003. № 1. P. 119...122.

12. The effect of liquid viscosity on sliding friction coefficient of wet granular materials / Mojgan Aliasgari Nahid, Maleki-Jirsaraei, Shahin Rouhani // Epj Web of Conferences Published on 07 Jun 2021.

REFERENCES

1. Patent RU2646796 G01N3/56 07.03. Method for assessing the efficiency of lubricants.
2. *Blinov O.V., Godlevsky V.A.* Program for constructing a virtual tribosystem with a lubricating layer // Certificate of state registration of a computer program No. 2016611598 dated 26.05.2016.
3. *Blinov O.V., Godlevsky V.A.* Program for assessing the efficiency of lubricants // Certificate of state. computer program registration No. 2016662002 dated October 27, 2016
4. HyperChem® Release 7 for Windows® Getting Started, 2002. 339 p.
5. *Anikin A.S., Bolshakova O.A., Gasnikova A.V. et al.* Algorithms for local minimization of the force field for three-dimensional representation of macromolecules // Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2019. Vol. 59, No. 12. P. 2060...2076.
6. A q-Polak–Ribière–Polyak conjugate gradient algorithm for unconstrained optimization problems / Shashi Kant Mishra, Suvra Kanti Chakraborty, Mohammad EsmaelSamei // Journal of Inequalities and Applications. 2021, no. 25.
7. *Golubev V.K.* Consideration of the possibility of using semi-empirical calculation methods for constructing and determining the properties of methane clusters. – <https://sci-article.ru/stat.php?i=1610303645>.
8. *Marx D., Hutter J.* Ab Initio Molecular Dynamics: Theory and Implementation // Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry, J. Groten-dorst (Ed.), NIC Series. 2000. Vol. 1. Pp. 301...449.
9. *Vedenov A.A.* Physics of Solutions. Moscow: Nauka, 1984. 108 p.
10. Surface Phenomena and Surface-Active Substances: handbook / ed. A.A. Abramzon and E.D. Shchukin. L.: Chemistry, 1984. 392 p.
11. *Filichev V.T., Glazunov A.V.* Mathematical modeling of the dynamics of a single-roller fabric transport zone taking into account friction forces // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Seriya Tekhnologiya Tekstil'noi Promyshlennosti. 2003, No. 1. P. 119...122.
12. The effect of liquid viscosity on sliding friction coefficient of wet granular materials / Mojgan Aliasgari Nahid, Maleki-Jirsaraei, Shahin Rouhani // Epj Web of Conferences Published on 07 Jun 2021.

Рекомендована кафедрой мехатроники и радиоэлектроники ИВГПУ. Поступила 21.11.24.