

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения
Российской академии наук

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**Перспективные материалы
с иерархической структурой
для новых технологий
и надежных конструкций**

19 - 23 сентября 2016 г.

Томск, Россия

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

4. Проблемы компьютерного конструирования материалов с иерархической структурой

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЧАСТИЦ SiO₂ И УГЛЕРОДА В АМОРФНО-ПОДОБНОМ СОСТОЯНИИ

Дмитриев А.И.^{1,2}, Никонов А.Ю.^{1,2}, Ёстерле В.³

¹НИ Томский государственный университет, Томск, Россия,

²Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск, Россия,

³Федеральный институт исследования и тестирования материалов, Берлин, Германия
dmitr@ispms.ru

Углеродные волокна и наночастицы диоксида кремния широко используются в различных полимерных композитах либо по отдельности, либо, в комбинации, в том числе и в сочетании с другими добавкам. По сравнению с чистыми полимерами композиты, армированные только углеродными волокнами, уже демонстрируют существенно более высокую прочность и износостойкость. С другой стороны, ряд интересных свойств для полимерных материалов был получен путем добавления в них наночастиц диоксида кремния (SNP от английского «silica nanoparticles»). В частности, трибологические исследования, описанные в работе [1] показали, что область применения полимерных нанокомпозитов (НК) с функциональными наполнителями микронного размера может быть расширена за счет добавления в них небольшого объема неорганических частиц нанометрового масштаба. В цитируемой работе отмечается, что в этом отношении особенно эффективны частицы SNP, поскольку добавление уже 0,05 об.% является достаточным, чтобы оказать ощутимое влияние на эволюцию трения.

Очевидно, что для изучения влияния SNP на фрикционные характеристики полимерного нанокомпозита необходимо детальное исследование состава и структуры формируемого на поверхности контактирующих тел трибологического интерфейса или трибопленки. В предыдущих работах нами было показано, что трибопленки, образующиеся в процессе торможения автомобильной тормозной системы, содержат структурные особенности на нанометровом масштабе [3]. Трибослой на основе наночастиц диоксида кремния и углерода является наиболее ожидаемым условием обеспечения уникальных фрикционных свойств полимерного НК. В силу сложности экспериментального изучения указанного масштаба уровня непосредственно в процессе скольжения, важным представляется разработка и построение численной модели для описания условий относительного проскальзывания и понимания особенностей поведения трибосистемы. Таким образом цель данной работы заключалась как в разработке численной модели формируемой трибопленки и получения необходимых механических свойств составных элементов рассматриваемой трибосистемы, так и в изучении особенностей ее поведения в условиях сухого трения.

В работе использованы численные методы дискретного подхода различного масштаба. На атомном масштабе это метод молекулярной динамики. На большем масштабе – метод подвижных клеточных автоматов. Результаты исследования позволили выявить различные механизмы относительного проскальзывания, которые в том числе способствуют проявлению низких фрикционных свойств исследуемых материалов.

Литература:

1. Zhang, G.; Häusler, I.; Österle, W.; Wetzel, B.; Jim, B. Formation and function mechanisms of nanostructured tribofilms of epoxy-based hybrid nanocomposites. *Wear* 2015, 342-343, 181-188.
2. Österle, W.; Dmitriev, A.I.; Wetzel, B.; Zhang, G.; Häusler, I.; Jim, B.C. The role of carbon fibers and silica nanoparticles on friction and wear reduction of an advanced polymer matrix composite. *Materials and Design* 2016, 93, 474-484..

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ №14-19-00718.