

УДК 621.892

Молекулярное моделирование кинетики фрикционного разрушения полимерных композитов на примере Ф4К20

Ли Сяньшунь¹, Е.Б. Седакова²

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
ул. Политехническая, д. 29, г. Санкт-Петербург 195251, Россия

²Институт проблем машиноведения РАН,
В.О. Большой просп., д. 61, г. Санкт-Петербург 199178, Россия

Поступила в редакцию 12.04.2022.

После доработки 24.11.2022.

Принята к публикации 28.11.2022.

Исследовано влияние дисперсного наполнителя в виде литейного кокса на износостойкость композита на основе политетрафторэтилена методом молекулярной динамики. Применение этого метода позволило исследовать причины повышения износостойкости полимерного композита на молекулярном уровне. Построены двухслойные молекулярные модели ПТФЭ и его композита Ф4К20, состоящего из 80 об. % ПТФЭ + 20 об. % литейного кокса. Проведено компьютерное моделирование отделения продуктов износа из двух зон, располагающихся в области трибоконтакта. Показаны различия в значениях величин энергий межмолекулярного взаимодействия в зависимости от исходного положения отделяемых молекул. Получено, что величина энергии межмолекулярного взаимодействия, определённая при моделировании поверхностного разрушения Ф4К20, более чем на 30 % превышает этот показатель, определённый для ПТФЭ. Проведён расчёт силы внутреннего трения в моделях ПТФЭ и Ф4К20. Получено, что сила внутреннего трения, определяемая на молекулярном уровне, в Ф4К20 существенно превосходит этот же показатель, определённый для ПТФЭ. Проведена визуализация процесса разрушения построенных моделей. Отмечено, что при отделении молекул с поверхности обеих моделей наблюдаются только молекулы ПТФЭ. Если же процесс разрушения Ф4К20 захватывает и приповерхностную область, дополнительно инициируется отделение молекул литейного кокса. В результате проведенных исследований дана численная оценка изменения характеристик межмолекулярного взаимодействия при введении в полимер наполнителя, приводящих к повышению износостойкости композитов на основе ПТФЭ более, чем на два порядка, что и отмечается многими исследователями. Результаты исследований могут быть использованы при разработке новых композиционных материалов, включая нанокompозиты.

Ключевые слова: полимер, политетрафторэтилен, композит, износостойкость, износ, энергия межмолекулярного взаимодействия, кинетическая энергия, потенциальная энергия.

DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-6-612-620

Адрес для переписки:

Е.Б. Седакова
Институт проблем машиноведения РАН,
В.О. Большой просп., д. 61, г. Санкт-Петербург 199178, Россия
e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Address for correspondence:

E.B. Sedakova
Institute for Problems in Mechanical Engineering of the Russian
Academy of Sciences,
Bolshoy prospect V.O., d.61, Saint-Petersburg 199178, Russia
e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Для цитирования:

Ли Сяньшунь, Е.Б. Седакова.
Молекулярное моделирование кинетики фрикционного разрушения полимерных композитов на примере Ф4К20.
Трение и износ.
2022. — Т. 43, № 6. — С. 612—620.
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-6-612-620

For citation:

Li Syanshun and E.B. Sedakova.
[Molecular Modeling of Frictional Fracture Kinetics of Polymer Composites Using F4K20 as an Example].
Trenie i Iznos.
2022, vol. 43, no. 6, pp. 612—620 (in Russian).
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-6-612-620

Molecular Modeling of Frictional Fracture Kinetics of Polymer Composites Using F4K20 as an Example

Li Syanshun¹ and E.B. Sedakova²

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Politekhnikeskaya Ulitsa, 29, Saint-Petersburg 195251, Russia

²Institute for Problems in Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences,
Boljshoy prospekt V.O., d. 61, Saint-Petersburg 199178, Russia

Received 12.04.2022.

Revised 24.11.2022.

Accepted 28.11.2022.

Abstract

The influence of dispersed filler in the form of foundry coke on the wear resistance of polytetrafluoroethylene-based composite has been studied by the method of molecular dynamics. The application of this method made it possible to investigate the causes of increasing the wear resistance of the polymer composite at the molecular level. Two-layer molecular models of PTFE and its composite F4C20, consisting of 80 vol. % PTFE + 20 vol. % foundry coke were made. Computer simulation of wear products separation from two zones located in the tribocontact area has been performed. Differences in values of energy values of intermolecular interaction depending on the initial position of the separated molecules are shown. It was found that the energy value of intermolecular interaction determined by simulating the surface fracture of F4C20 is more than 30 % higher than that determined for PTFE. The calculation of internal friction force in models of PTFE and F4C20 has been carried out. It was obtained that the internal friction force calculated at the molecular level in F4C20 significantly higher than the same parameter calculated for PTFE. Visualization of the fracture process of the constructed models was carried out. It is noted that only PTFE molecules are observed when molecules are separated from the surface of both models. If the fracture process of F4C20 includes the near-surface region, the separation of foundry coke molecules is additionally initiated. As a result of the carried out investigations a numerical estimation of change of characteristics of intermolecular interaction with the introduction of a filler into polymer resulting in more than two degrees increased wear resistance of PTFE-based composites is given, which is noted by many researchers. The research results can be used for the development of new composite materials including nanocomposites.

Keywords: polymer, polytetrafluoroethylene, composite, wear resistance, wear, energy of intermolecular interaction, kinetic energy, potential energy.

DOI:10.32864/0202-4977-2022-43-6-612-620

Адрес для переписки:

Е.Б. Седакова
Институт проблем машиноведения РАН,
В.О. Большой просп., д. 61, г. Санкт-Петербург 199178, Россия
e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Address for correspondence:

E.B. Sedakova
Institute for Problems in Mechanical Engineering of the Russian
Academy of Sciences,
Boljshoy prospekt V.O., d. 61, Saint-Petersburg 199178, Russia
e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Для цитирования:

Ли Сяньшунь, Е.Б. Седакова.
Молекулярное моделирование кинетики фрикционного
разрушения полимерных композитов на примере Ф4К20.
Трение и износ.
2022. — Т. 43, № 6. — С. 612–620.
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-6-612-620

For citation:

Li Syanshun and E.B. Sedakova.
[Molecular Modeling of Frictional Fracture Kinetics of Polymer
Composites Using F4K20 as an Example].
Trenie i Iznos.
2022, vol. 43, no. 6, pp. 612–620 (in Russian).
DOI: 10.32864/0202-4977-2022-43-6-612-620

Список использованных источников

1. **Иголинская Н.М., Костенко О.В.** Рентгеноструктурный анализ полимеров. — Кемерово: КузГТУ. — 2008
2. **Богун В.С., Бахарева В.Е., Анисимов А.В.** Подшипники скольжения из антифрикционных углепластиков для центробежных насосов энергетических установок // Вопросы материаловедения. — 2010, №1(61), 60—66
3. **Chen W.X., Li F., Han G., Xia J.B., Wang L.Y., Tu J.P., and Xu Z.D.** Tribological behavior of Carbon-Nanotube-Filled PTFE Composites // Tribol. Lett. — 2003 (15), 275—278
4. **Мышкин Н.К., Zhang G., Гурцев Д.М., Григорьев Ф.А., Wang W., Li G.** Характеристики нанокompозитов на основе ПЭЭК при трении по стали // Трение и износ. — 2021 (42), № 3, 350—357
5. **Седякова Е.Б., Козырев Ю.П.** Тепловая нагрузка полимера в паре трения политетрафторэтилен-сталь // Трение и износ. — 2017 (38), № 5, 386—390
6. **Lin F., Xiang Y., and Shen H.S.** Temperature Dependent Mechanical Properties of Graphene Reinforced Polymer Nanocomposites. A Molecular Dynamics Simulation // Compos. Part B Eng. — 2017(111), 261—269
7. **Liu F., Hu N., Ning H., Atobe S., Yan C., Liu Y., et al.** Investigation on the Interfacial Mechanical Properties of hybrid Graphene-Carbon Nanotube/Polymer Nanocomposites // Carbon. — 2017 (115), 694—700
8. **Zhen Zuo, Yulin Yang, Xiaowen Qi, Wenwen Su, and Xiangchao Yang.** Analysis of the Chemical Composition of the PTFE Transfer Film Produced by Sliding Against Q235 Carbon Steel // Wear. — 2014 (320), 87—93
9. **David Rigby, Huai Sun, and B.E. Eichinger.** Computer Simulations of Poly (Ethylene Oxide): Force Field, PVT Diagram and Cyclization Behaviour // Polymer International. — 1997 (44), 311—330
10. **Huai Sun, Zhao Jin, Chunwei Yang, Reinier L.C. Akkermans, Struan H. Robertson, Neil A. Spensley, Simon Miller, and Stephen M. Todd.** COMPASSII: Extended Coverage for Polymer and Drug-Like Molecule Databases // Journal of Molecular Modeling. — 2016 (22), 1—10

References

1. **Igolinskaya N.M., Kostenko O.V.** Rentgenostrukturalnyy analiz polymerov. — Kemerovo: KuzGTU. — 2008 (in Russian)
2. **Bogun V.S., Bakhareva V.E., Anisimov A.V.** Podshipniki skolgeniya iz antifrikcionnykh ugleplastykov dlya chentrobegnykh nasosov energeticheskikh ustanovok // Voprosymaterialovedeniya. — 2010, № 1(61), 60—66 (in Russian)
3. **Chen W.X., Li F., Han G., Xia J.B., Wang L.Y., Tu J.P., and Xu Z.D.,** Tribological behavior of Carbon-Nanotube-Filled PTFE Composites //Tribol. Lett. — 2003 (15), 275—278
4. **Myshkin N.K., Zhang G., Gutsev D.M., Grigoriev F.A., Wang W., and Li G.** Performance of PEEK-Based Nanocomposites at Dry Friction Against Steel // Journal of Friction and Wear. — 2021 (42), no. 3, 225—229
5. **Sedakova E.B. and Kozyrev Y.P.** Polymer Thermal Loading in the Polytetrafluoroethylene-Steel Friction Pair // Journal of Friction and Wear. — 2017 (38), no. 5
6. **Lin F., Xiang Y., and Shen H.S.** Temperature Dependent Mechanical Properties of Graphene Reinforced Polymer Nanocomposites. A Molecular Dynamics Simulation // Compos. Part B Eng. — 2017 (111), 261—269
7. **Liu F., Hu N., Ning H., Atobe S., Yan C., Liu Y., et al.** Investigation on the Interfacial Mechanical Properties of hybrid Graphene-Carbon Nanotube/Polymer Nanocomposites // Carbon. — 2017 (115), 694—700
8. **Zhen Zuo, Yulin Yang, Xiaowen Qi, Wenwen Su, and Xiangchao Yang.** Analysis of the Chemical Composition of the PTFE Transfer Film Produced by Sliding Against Q235 Carbon Steel // Wear. — 2014 (320), 87—93
9. **David Rigby, Huai Sun, and B.E. Eichinger.** Computer Simulations of Poly (Ethylene Oxide): Force Field, PVT Diagram and Cyclization Behaviour // Polymer International. — 1997 (44), 311—330
10. **Huai Sun, Zhao Jin, Chunwei Yang, Reinier L.C. Akkermans, Struan H. Robertson, Neil A. Spensley, Simon Miller, and Stephen M. Todd.** COMPASSII: Extended Coverage for Polymer and Drug-Like Molecule Databases // Journal of Molecular Modeling. — 2016 (22), 1—10

Для приобретения полного текста статьи, обращайтесь в редакцию журнала.
Адрес редакции: 246050, ул. Кирова 32а, г. Гомель, Беларусь. Телефон/факс: +375 (232) 34 06 36 / 34 17 11
Full text of articles can be purchased from the editorial office.
Address: 32a Kirov Street, Gomel, Belarus, 246050. Phone: +375 (232) 34 06 36. Fax: +375 (232) 34 17 11
E-mail: FWJ@tut.by