

УДК 621.892

Математический подход к оценке износостойкости конструкционных полимерных нанокомпозитов на молекулярном уровне

Е.Б. Седакова¹, А.Д. Бреки^{1,2}, М.А. Скотникова², С. Ли³

¹Институт проблем машиноведения РАН,
Большой пр. ВО, д. 61, г. Санкт-Петербург 199178, Россия

²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Политехническая ул., д. 29, г. Санкт-Петербург 195251, Россия

³Chengdu Aeronautic Polytechnic,
East 7th Road, No. 699, Checheng, Longquanyi, Chengdu 610100, China

Поступила в редакцию 14.02.2025.

Проведен анализ структурной модели композитов, разработанной для случая диспергирования наполнителей в расплаве полимеров. Показано, что применение выражения для определения нагруженности матрицы, характеризующего долю внешней приложенной нагрузки, приходящейся на матрицу, недостаточно для сравнительной оценки износостойкости разрабатываемых композитов при одинаковых концентрациях и средних размерах дисперсных наполнителей, но состоящих из различных материалов. Для уточнённой оценки износостойкости таких композитов предложен дополнительный критерий, учитывающий энергетическую характеристику взаимодействия матрицы и наполнителя на молекулярном уровне.

Проведено компьютерное моделирование молекулярных структур полиэфирэфиркетона и двух его нанокомпозитов, содержащих фуллерен и наноразмерную медь, с определением модулей сдвига и энергий межмолекулярного взаимодействия в объёме исследуемых материалов и на границе раздела фаз матрица — наполнитель. Отмечено, что при введении нанонаполнителей повышаются значения модулей сдвига и объёмных энергий межмолекулярного взаимодействия. При этом наиболее существенное повышение, более чем в 2,5 раза, отмечено у величины энергии межмолекулярного взаимодействия на границе раздела фаз матрица—наполнитель в композите, содержащем наномедь, по сравнению с композитом, содержащим фуллерен. Таким образом, этот параметр предложен в качестве дополнительного для оценки износостойкости нанокомпозитов на стадии их разработки.

Ключевые слова: износостойкость, полиэфирэфиркетон, нанонаполнитель, фуллерен, наноразмерная медь, молекулярная динамика, энергия межмолекулярного взаимодействия, адгезионная прочность.

DOI: 10.32864/0202-4977-2025-46-3-261-269

Адрес для переписки:

Е.Б. Седакова
Институт проблем машиноведения РАН,
Большой пр. ВО, 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 prospekt V.O., 61, Saint-Petersburg 199178, Russia
e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Для цитирования:

Е.Б. Седакова, А.Д. Бреки, М.А. Скотникова, С. Ли.
Математический подход к оценке износостойкости
конструкционных полимерных нанокомпозитов на молекулярном
уровне.
Трение и износ.
2025. — Т. 46, № 3. — С. 261–269.
DOI: 10.32864/0202-4977-2025-46-3-261-269

For citation:

E.B. Sedakova, A.D. Breki, M.A. Skotnikova, and S. Li.
[Mathematical Approach to Estimation the Wear Resistance of Filling
Industrial Polymer Nanocomposites at the Molecular Level].
Trenie i Iznos.
2025, vol. 46, no. 3, pp. 261–269 (in Russian).
DOI: 10.32864/0202-4977-2025-46-3-261-269

Mathematical Approach to Estimation the Wear Resistance of Filling Industrial Polymer Nanocomposites at the Molecular Level

E.B. Sedakova¹, A.D. Breki^{1,2}, M.A. Skotnikova², and S. Li³

¹*Institute for Problems in Mechanical Engineering of the Russian Academy of Sciences, Bolshoy prospekt V.O., 61, Saint-Petersburg 199178, Russia*

²*Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Politekhnikeskaya Ulitsa, 29, Saint-Petersburg 195251, Russia*

³*Chengdu Aeronautic Polytechnic, East 7th Road, No. 699, Checheng, Longquanyi, Chengdu 610100, China*

Received 14.02.2025.

Abstract

The analysis of the structural model of composites developed for the case of dispersion of fillers in the polymer melt is carried out, it is shown that the use of the expression for determining the matrix loading characterizing the share of external applied load falling on the matrix is not effective enough for comparative assessment of wear resistance of developed composites at the same concentrations and average sizes of dispersed fillers, but consisting of different materials. For the possibility of a refined assessment of wear resistance of such composites an additional criterion taking into account the energy characteristic of interaction between matrix and filler at the molecular level is proposed. Computer modeling of the molecular structures of polyetheretherketone and its two nanoscale composites containing fullerene and nanoscale copper was carried out to determine the shear modulus and intermolecular interaction energies in the volume of the materials under study and at the matrix—filler interface. It is noted that the introduction of nanoscale fillers increases the values of shear modulus and volumetric energies of intermolecular interaction. At the same time, the most significant increase, by more than 2.5 times, was noted in the value of the energy of intermolecular interaction at the interface of the matrix—filler phases in a composite containing nanosized copper, compared with a composite containing fullerene. Thus, this parameter is proposed as an additional parameter for assessing the wear resistance of nanoscale composites at the stage of their development.

Keywords: wear resistance, polyetheretherketone, nanoscale filler, fullerene, nanoscale copper, molecular dynamics, intermolecular interaction energy, adhesion strength.

DOI: 10.32864/0202-4977-2025-46-3-261-269

Адрес для переписки:

Е.Б. Седакова
Институт проблем машиноведения РАН,
Большой пр. ВО, 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 prospekt V.O., 61, Saint-Petersburg 199178, Russia
e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Для цитирования:

Е.Б. Седакова, А.Д. Бреки, М.А. Скотникова, С. Ли.
Математический подход к оценке износостойкости
конструкционных полимерных нанокомпозитов на молекулярном
уровне.
Трение и износ.
2025. — Т. 46, № 3. — С. 261–269.
DOI: 10.32864/0202-4977-2025-46-3-261-269

For citation:

E.B. Sedakova, A.D. Breki, M.A. Skotnikova, and S. Li.
[Mathematical Approach to Estimation the Wear Resistance of Filling
Industrial Polymer Nanocomposites at the Molecular Level].
Trenie i Iznos.
2025, vol. 46, no. 3, pp. 261–269 (in Russian).
DOI: 10.32864/0202-4977-2025-46-3-261-269

Список использованных источников

1. Мышкин Н.К., Zhang G., Гуцев Д.М. и др. Характеристики нанокompозитов на основе ПЭЭК при трении по стали // Трение и износ. — 2021 (42), № 3, 350—357
2. Песецкий С.С., Богданович С.П., Мышкин Н.К. Триботехнические свойства нанокompозитов, получаемых диспергированием наполнителей в расплавах полимеров // Трение и износ. — 2007 (28), № 5, 500—524
3. Седакова Е.Б., Козырев Ю.П. Влияние содержания дисперсного наполнителя на адгезию между наполнителем и матрицей в полимерных нанокompозитах триботехнического назначения // Вопросы материаловедения. — 2013, № 3, 70—75
4. Tasuku O., Jun T., K. Kawasaki K., et al. Structure and Function of Transfer Film Formed from PTFE/PEEK Polymer Blend // The Journal of Physical Chemistry C. — 2017 (121), no. 27, 14589—14596
5. Friction and Wear of Polymer Composites / Ed. by K. Fridrich. — Amsterdam: Elsevier Scien. Pub. — 1986
6. Берлин А.А., Вольфсон С.А., Ошмян В.Г., Ениколопов Н.С. Принципы создания композиционных полимерных материалов. — М.: Химия. — 1990
7. Мандельброт Бенуа Б. Фрактальная геометрия природы. — М.: Институт компьютерных исследований. — 2002
8. He E., Wang S., Li Y., et. al. Enhanced Tribological Properties of Polymer Composites by Incorporation of Nano-SiO₂ Particles: a Molecular Dynamics Simulation Study // Computational Materials Science. — 2017 (134), 93—99
9. Fan S., Gao C., Duan C., et al. Geometry Effect of Copper Nanoparticles and Nanowires on Polyetheretherketone-Matrix Nanocomposites: Thermal Conductivity, Dynamic Mechanical Properties and Wear Resistance // Composites Science and Technology. — 2022, no. 219, 109224
10. Антифрикционный полимерный материал: Патент на изобретение RU 2378297. — 2010 / Б.М. Гинзбург, А.П. Возняковский, С.И. Евлащенко, Д.Г. Точильников
11. Savagatrup S., Makaram A.S., Burke D.J., et al. Mechanical Properties of Conjugated Polymers and Polymer-Fullerene Composites as a Function of Molecular Structure // Advanced Functional Materials. — 2014 (24), no. 8, 1169—1181
12. Kim J.H., Noh J., Choi H., et al. Mechanical Properties of Polymer-Fullerene Bulk Heterojunction Films: Role of Nanomorphology of Composite Films // Chemistry of Materials. — 2017 (29), no. 9, 3954—3961
13. Molefi J.A., Luyt A.S., and Krupa I. Comparison of the Influence of Copper Micro- and Nano-Particles on the Mechanical Properties of Polyethylene/Copper Composites // Journal of materials science. — 2010 (45), no. 1, 82—88
14. Harandi M.H., Alimoradi F., Rowshan G., et al. Morphological and Mechanical Properties of Styrene Butadiene Rubber/Nano Copper Nanocomposites // Results in physics. — 2017 (7), 338—344
15. Sun Huai, Jin Zhao, Yang Chunwei, Akkermans Reinier L. C., Robertson Struan H., Spenley Neil A., Miller Simon, and Todd Stephen M. COMPASSII: Extended Coverage for Polymer and Drug-Like Molecule Databases // Journal of Molecular Modeling. — 2016 (22), 1—10
16. Ли Сяньшунь. Методика оценки износостойкости полимерных нанокompозиционных покрытий / Автореф. дис. ... канд. техн. наук. — Санкт-Петербург. — 2023
17. Atkinson J.R., Hay J.N., and Jenkins M.J. Enthalpic Relaxation in Semi-Crystalline PEEK // Polymer. — 2002 (43), no. 3, 731—735

References

1. Myshkin N.K., Gutsev D.M., Grigoriev F.A., Zhang G., 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
2. Pesetskii S.S., Bogdanovich S.P., and Myshkin N.K. Tribological Behavior of Nanocomposites Obtained by Dispersion of Fillers in Polymer Melts // Journal of Friction and Wear. — 2007 (28), no. 5, 500—524
3. Sedakova E.B., Kozыrev Yu.P. Influence of the disperse filler contents on adhesion ability of a matrix in polymeric nanosize composites tribotechnical purposes // Voprosi Materialovedeniya. — 2013, № 3, 70—75 (in Russian)
4. Tasuku O., Jun T., K. Kawasaki K., et al. Structure and Function of Transfer Film Formed from PTFE/PEEK Polymer Blend // The Journal of Physical Chemistry C. — 2017 (121), no. 27, 14589—14596
5. Friction and Wear of Polymer Composites / Ed. by K. Fridrich. — Amsterdam: Elsevier Scien. Pub. — 1986
6. Berlin A.A., Volfson S.A., Oshmyan V.G., Enikolopov N.S. Prinsipi sozdaniya compositsonnih polymernih materialov. — Moscow: Khimiya. — 1990 (in Russian)
7. Benoit B. Mandelbrot. The fractal geometry of nature. — Moscow. — 2010 (in Russian)
8. He E., Wang S., Li Y., et. al. Enhanced Tribological Properties of Polymer Composites by Incorporation of Nano-SiO₂ Particles: a Molecular Dynamics Simulation Study // Computational Materials Science. — 2017 (134), 93—99
9. Fan S., Gao C., Duan C., et al. Geometry Effect of Copper Nanoparticles and Nanowires on Polyetheretherketone-Matrix Nanocomposites: Thermal Conductivity, Dynamic Mechanical Properties and Wear

- Resistance // Composites Science and Technology. — 2022, no. 219, 109224
10. **Antifrikcionnuy polymernuy material:** Patent na izobreteniyе RU 2378297. — 2010 / B.M. Ginzburg, A.P. Voznyakovski, S.I. Evlashtnko, D.G. Tochilnikov (in Russian)
 11. **Savagatrup S., Makaram A.S., Burke D.J., et al.** Mechanical Properties of Conjugated Polymers and Polymer-Fullerene Composites as a Function of Molecular Structure // Advanced Functional Materials. — 2014 (24), no. 8, 1169—1181
 12. **Kim J.H., Noh J., Choi H., et al.** Mechanical Properties of Polymer-Fullerene Bulk Heterojunction Films: Role of Nanomorphology of Composite Films // Chemistry of Materials. — 2017 (29), no. 9, 3954—3961
 13. **Molefi J.A., Luyt A.S., and Krupa I.** Comparison of the Influence of Copper Micro- and Nano-Particles on the Mechanical Properties of Polyethylene/Copper Composites // Journal of materials science. — 2010 (45), no. 1, 82—88
 14. **Harandi M.H., Alimoradi F., Rowshan G., et al.** Morphological and Mechanical Properties of Styrene Butadiene Rubber/Nano Copper Nanocomposites // Results in physics. — 2017 (7), 338—344
 15. **Sun Huai, Jin Zhao, Yang Chunwei, Akkermans Reinier L. C., Robertson Struan H., Spenley Neil A., Miller Simon, and Todd Stephen M.** COMPASSII: Extended Coverage for Polymer and Drug-Like Molecule Databases // Journal of Molecular Modeling. — 2016 (22), 1—10
 16. **Li Syanshun.** Metodika otsenki iznosostoikosti polymernuh nanokompozicionnukh pokruti / Avto-referat dissertatci na soiskanie uchenoi stepeni kandidat technicheskikh navuk. — Saint-Peterburg. — 2023 (in Russian)
 17. **Atkinson J.R., Hay J.N., and Jenkins M.J.** Enthalpic Relaxation in Semi-Crystalline PEEK // Polymer. — 2002 (43), no. 3, 731—735

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