

---

## НАДЕЖНОСТЬ, ПРОЧНОСТЬ, ИЗНОСОСТОЙКОСТЬ МАШИН И КОНСТРУКЦИЙ

---

УДК 621.01

### РАЗРАБОТКА КРИТЕРИЯ, ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО К ИЗНОСУ, НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОВЕРХНОСТНОГО РАЗРУШЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ МОДЕЛЕЙ ПОЛИТЕТРАФОРЭТИЛЕНА И Ф4К20

© 2025 г. С. Ли<sup>1</sup>, Е. Б. Седакова<sup>2, \*</sup>, А. О. Поздняков<sup>2, 3</sup>, А. Д. Бреки<sup>2, 4</sup>

<sup>1</sup>*Chengdu Aeronautic Polytechnic, Chengdu, China*

<sup>2</sup>*Институт Проблем Машиноведения РАН (ИПМашРАН),*

*Санкт-Петербург, Россия*

<sup>3</sup>*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия*

<sup>4</sup>*Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,*

*Санкт-Петербург, Россия*

\*e-mail: elenasedakova2006@yandex.ru

Поступила в редакцию 27.04.2024 г.

После доработки 14.11.2024 г.

Принята к публикации 20.10.2025 г.

Выполнен расчет ряда энергетических параметров молекулярных моделей политетрафорэтилена и его композита Ф4К20. В результате моделирования трения и износа определены величины энергий межмолекулярных связей в объеме построенных моделей  $U_{inter}^V$  в поверхностной зоне  $U_{inter}^S$  и на границе раздела слой переноса — контртело, а также рассчитаны величины модулей сдвига моделей исследуемых материалов. Получено, что в Ф4К20 по сравнению с исходной матрицей происходит повышение всех указанных параметров, что может свидетельствовать о стабилизации кинетического состояния молекул в присутствии наполнителя. По результатам сравнительного анализа  $U_{inter}^V$ ,  $U_{inter}^S$  и  $U_{inter}^{ad}$  с величиной интенсивности линейного изнашивания, определенной для исследуемых материалов в результате триботехнических испытаний, в качестве критерия, чувствительного к износу на молекулярном уровне, предложена величина  $U_{inter}^V$ , а в качестве дополнительного параметра, характеризующего адгезионную прочность слоев переноса, предложено принимать величину  $U_{inter}^{ad}$ .

**Ключевые слова:** трение, износ, политетрафорэтилен, наполнитель, композит, интенсивность линейного изнашивания, слой переноса, адгезия, энергия межмолекулярных связей, молекулярная динамика

**DOI:** 10.31857/S0235711925010089, **EDN:** EQIQWX

Интерес к практическому использованию полимеров и полимерных композиционных материалов (ПКМ) в машиностроении связан с возможностью их применения в узлах трения, предназначенных для работы в агрессивных средах, включая морскую воду, а также, в подвижных соединениях, в которых по условиям эксплуатации исключено применение жидкой и консистентной смазки. Кроме того, замена на ПКМ традиционных машиностроительных материалов приводит к упрощению конструкций узлов трения, к экономии ресурсов, к снижению общей массы и продлению срока службы механизмов, к возможности работы механизмов в труднодо-

ступных условиях, где затруднено или невозможно проведение обслуживающих мероприятий.

Развитие технологий получения дисперсных наполнителей, включая наноразмерные, значительно расширяет ряд ПКМ и создает предпосылки для отнесения их к классу интеллектуальных материалов. Современные ПКМ обладают достаточно высокими физико-механическими свойствами, имеют сравнительно широкий нагрузочный и температурный диапазоны [1–5]. Однако для целенаправленного создания материалов с требуемыми триботехническими свойствами недостаточно рассматривать их как простую суперпозицию составляющих компонентов. Необходимо углубленное изучение особенностей взаимодействия матрицы и наполнителя, в том числе и на молекулярном уровне [6]. Имеющиеся физические модели ПКМ [7] чувствительны к размерам, содержанию, прочностным характеристикам материалов матрицы и наполнителя, а также учитывают структуру, образуемую дисперсным наполнителем в матрице, на надмолекулярном уровне. Однако они не объясняют отмечаемого разными авторами эффекта изменения износостойкости композитов при введении в одну и ту же матрицу различных дисперсных наполнителей в близких концентрациях и имеющих сходные размеры [6]. По-видимому, одной из причин имеющихся различий может быть изменение энергетических характеристик молекулярной структуры полимерных материалов в присутствии наполнителей [8–10]. Таким образом, установление закономерностей изменения параметров молекулярных структур ПКМ по сравнению с материалом матрицы и возможность сопоставления их с величиной износостойкости, может способствовать целенаправленной разработке композитов, обладающих оптимальными триботехническими свойствами в определенных условиях эксплуатации без необходимости увеличения количества экспериментальных данных.

В настоящей статье применен метод молекулярно-динамического моделирования для возможности оценки изменения энергетического состояния молекулярной структуры ПКМ по сравнению с материалом исходной матрицы. Для исследований были выбраны политетрафторэтилен (ПТФЭ) и его композит Ф4К20, состоящий из 80 об.% ПТФЭ и 20 об.% кокса, традиционно широко применяемые в узлах трения, физико-механические и трибологические свойства которых на макроуровне хорошо изучены, что, по нашему мнению, дает возможность проведения адекватной сравнительной оценки их износостойкости с изменением энергетических параметров молекулярных структур материалов, как в случае введения наполнителя в матрицу, так и в результате моделирования трения и поверхностного разрушения.

**Целью** настоящей статьи является выявление на молекулярном уровне параметра, чувствительного к износу и пригодного для сравнительной оценки износостойкости полимерных материалов.

**Метод исследования и материалы.** Известно, что полимеры и их композиты могут эффективно работать в узлах трения без смазки вследствие их способности при определенных режимах трения к образованию слоев переноса, разделяющих контактирующие поверхности. В соответствии с молекулярно-механической теорией работа силы трения затрачивается на разрыв адгезионных связей и пластическую деформацию. Тогда можно представить работу сил трения, как сумму работ сил адгезии  $A_t$  и износа  $A_I$

$$A_T = A_t + A_I. \quad (1)$$

Объем изношившегося материала за путь трения составляет

$$\Delta V = I_h L_T S, \quad (2)$$

где  $I_h$  — интенсивность изнашивания;  $L_T$  — путь трения;  $S$  — номинальная площадь контакта.

Работу, затраченную на износ единицы объема  $A_{I\Delta V}$ , можно записать в виде

$$A_{I\Delta V} = \frac{A_I}{\Delta V}. \quad (3)$$

Согласно молекулярно-механической теории трения, молекулярная составляющая коэффициента трения

$$f = \frac{\tau_0}{p_r} + \beta, \quad (4)$$

где  $\tau_0$  — удельная адгезия;  $p_r$  — фактическое давление на контакте;  $\beta$  — пьезокоэффициент.

Перепишем выражение (4) в виде

$$fNL_T = \tau_0 \frac{N}{p_r} L_T + \beta NL_T, \quad (5)$$

где  $N$  — внешняя нормальная сила.

Тогда, решая (2) относительно  $I_h$  и используя (3), окончательно находим из (5)

$$I_h = \frac{\beta}{A_{I\Delta V}} p_a, \quad (6)$$

где  $p_a$  — контактное давление.

Из (6) можно сделать вывод что, чем больше энергии трения затрачивается на разрушение единицы объема материала, тем меньше, при прочих равных условиях, интенсивность изнашивания [11].

Для достижения поставленной цели в компьютерной программе MATERIALS STUDIO были построены молекулярные модели ПТФЭ и Ф4К20, в которых атомы принято изображать шариками, а валентные связи стержнями, соединяющими шарики.

Модули сдвига и энергетические характеристики исследуемых материалов определялись с применением метода молекулярной динамики, который является эффективным методом для исследования физико-механических и триботехнических свойств материалов на молекулярном и атомном уровне. В [12, 13] отмечается, что этот метод можно использовать в качестве дополнительного для обоснования результатов экспериментальных исследований. Моделирование изнашивания проводилось в силовом поле COMPASS, которое является первым силовым полем, позволяющим достаточно точно прогнозировать свойства конденсированной фазы различных молекул и полимеров в случае внешнего воздействия [14]. При этом полная потенциальная энергия модели  $E$  рассматривается состоящей из ряда слагаемых [14, 15]

$$\begin{aligned} E = & \sum E^{(b)} + \sum E^{(\Theta)} + \sum E^{(\phi)} + \sum E^{(\gamma)} + E^{(bb')} + \sum E^{(b\Theta)} + \\ & + \sum E^{(b\phi)} + \sum E^{(b'\phi)} + \sum E^{(\Theta\Theta')} + \sum E^{(\Theta\phi)} + \\ & + \sum E^{(\Theta\Theta'\phi)} + \sum E^{(vdw)} + \sum E^{(elec)}, \end{aligned}$$

где  $b$  и  $b'$  — длины двух соседних связей, соответственно;  $\theta$  и  $\theta'$  — смежные углы между связями;  $\gamma$  — угол отклонения от плоскости;  $\phi$  — двугранный угол кручения.

Слагаемые в (7) можно разделить на две категории, а именно,  $\sum E^{(b)}$ ,  $\sum E^{(\Theta)}$ ,  $\sum E^{(\phi)}$ ,  $\sum E^{(\gamma)}$  — слагаемые, учитывающие вклад в величину полной потенциальной энергии каждой из составляющих;  $\sum E^{(bb')}$ ,  $\sum E^{(b\Theta)}$ ,  $\sum E^{(b\phi)}$ ,  $\sum E^{(b'\phi)}$ ,  $\sum E^{(\Theta\Theta')}$ ,  $\sum E^{(\Theta\phi)}$ ,  $\sum E^{(\Theta\Theta'\phi)}$  — слагаемые, учитывающие вклад в величину  $E$ , вносимые потенциальными энергиями перекрестных связей между составляющими. Последние два слагаемых в (7) представляют энергию несвязанного потенциала модели. Энергия сил Ван-дер-Ваальса,  $E^{(vdw)}$ , представляется суммой отталкивающих и притягивающих членов Леннарда-Джонса. Потенциал электростатической силы,  $E^{(elec)}$ , представляется суммой энергетических взаимодействий между атомами. Последние два слагаемых в (7) представляют собой энергию несвязанного потенциала, которую можно рассчитать по выражению [14, 15]

$$\sum \text{nonbond} = \sum E^{(vdw)} + \sum E^{(elec)} = \sum \varepsilon_{ij} \left[ 2\left(\frac{r_{ij}^0}{r_{ij}}\right)^9 - 3\left(\frac{r_{ij}^0}{r_{ij}}\right)^6 \right] + \sum \frac{q_i q_j}{4\pi \varepsilon_0 r_{ij}}, \quad (8)$$

где  $r_{ij}$  — расстояние между центрами частиц;  $\varepsilon_{ij}$  — глубина потенциальной ямы;  $r_{ij}^0$  — расстояние, на котором энергия взаимодействия становится равна нулю;  $\varepsilon_0$  — электрическая постоянная;  $q_i, q_j$  — заряды атомов, не кратные зарядам электронов, возникающие вследствие того, что атомы одних элементов стремятся притянуть к себе электронную пару ковалентной связи сильнее, чем атомы других элементов. При расчете несвязанного взаимодействия применялось ограничение радиуса взаимодействия до 1.55 нм [16].

**Результаты исследований и их обсуждение.** Для определения физико-механических свойств ПТФЭ и Ф4К20 на молекулярном уровне были построены их молекулярные модели, заключенные в единичные объемы (ячейки) кубической формы с размерами ребер 37.81 (Å) и 38.46 (Å), которые после геометрической оптимизации методом сопряженных градиентов переводились в устойчивое состояние с среднеквадратичным значением точности сходимости энергии около 0.00001 ккал/моль. Пример визуализации молекулярных моделей исследуемых материалов представлен на рис. 1.

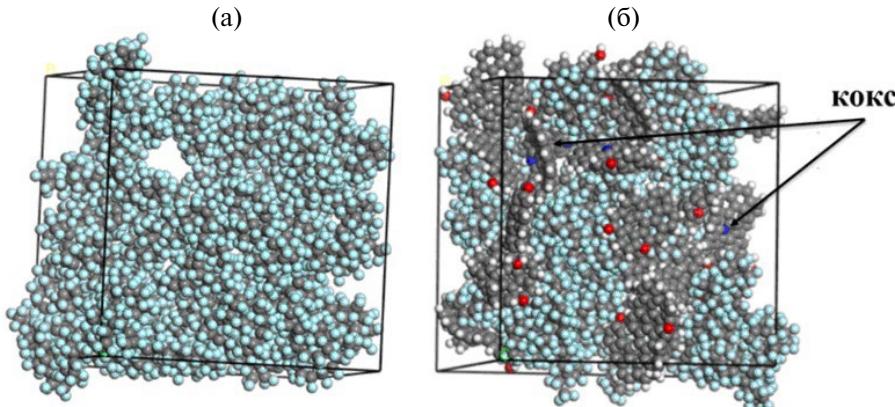


Рис. 1. Вариант визуализации молекулярных моделей после геометрической оптимизации:  
(а) модель ПТФЭ. (б) модель Ф4К20.

Сравнительный анализ механических свойств исследуемых материалов проводился по результатам последних 30 визуализаций деформаций растяжения—сжатия молекулярных моделей материалов при определенном давлении, числе частиц и стабильной температуре  $T = 300$  К в течение 10 пс после каждого изменения размера ячейки. В результате были получены матрицы жесткости  $C_{ij}$  и упругости  $S_{ij}$  размером  $6 \times 6$ , причем  $C_{ij} = S_{ij}^{-1}$ . Модули сдвига для молекулярных моделей ПТФЭ и его композита рассчитывались методами Voigt ( $G_V$ ) и Reuss ( $G_R$ ) [17] по (9) и (10). Эффективные модули сдвига рассчитывались по теории Hill ( $G_H$ ) по (11)

$$G_V = \frac{1}{15}(C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{44} + 2C_{55} + 2C_{66} - C_{12} - C_{13} - C_{23}); \quad (9)$$

$$G_R = \frac{15}{4(S_{11} + S_{22} + S_{33} - S_{12} - S_{13} - S_{23}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66})}; \quad (10)$$

$$G_H = \frac{1}{2}(G_V + G_R). \quad (11)$$

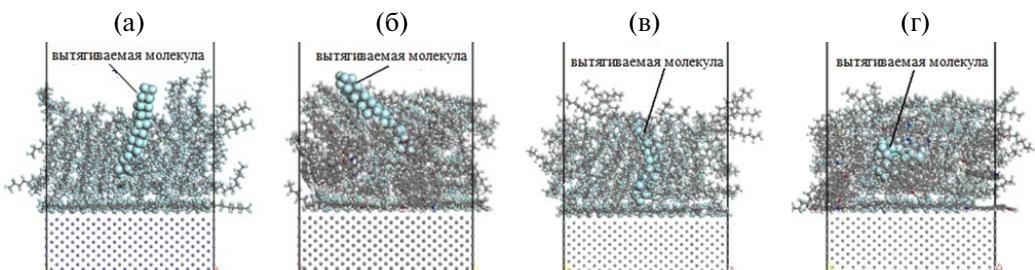
Кроме этого, были определены величины энергий межмолекулярного взаимодействия  $U_{inter}^V$  на примере построенных молекулярных моделей ПТФЭ и Ф4К20. В табл. 1 приведены результаты расчетов величин  $G_H$  и  $U_{inter}^V$ .

**Таблица 1.** Модули сдвига и средние значения энергий межмолекулярного взаимодействия моделей исследуемых материалов

	ПТФЭ	Ф4К20
Модуль сдвига $G_H$ , ГПа	0.39	0.66
Средние значения $U_{inter}^V$ , ккал/моль	123	1866

Из данных табл. 1 следует, что величина модуля сдвига модели Ф4К20 более, чем в 1.5 раза превышает это значение, определенное для модели ПТФЭ. Известно, что механические свойства полимерных материалов оказывают влияние на их трибологические свойства [18]. Так как при трении скольжения рабочие поверхности контактирующих материалов подвергаются сдвиговым деформациям [18], полученная разница в величинах модулей сдвига может быть одной из причин повышения износостойкости Ф4К20 по сравнению с исходной ПТФЭ матрицей. Как следует из данных табл. 1, средняя величина  $U_{inter}^V$  модели Ф4К20 приблизительно в 15 раз выше по сравнению с  $U_{inter}^V$  модели ПТФЭ. При этом расчеты показали, что величина энергии сил Ван-дер-Ваальса в модели Ф4К20 приблизительно в 3 раза больше, чем в модели ПТФЭ, а абсолютная величина энергии электростатического взаимодействия в модели Ф4К20 приблизительно в 2.5 раз больше, чем в модели ПТФЭ. По-видимому, увеличение  $U_{inter}^V$  при введении в полимер наполнителя можно объяснить образованием усиленной границы раздела между полимерной матрицей и наполнителем, в том числе за счет отмеченного повышения сил Ван-дер-Ваальса и сил электростатического взаимодействия, что может быть причиной повышения износостойкости Ф4К20 по сравнению с ПТФЭ.

Влияние наполнения на способность к поверхностному разрушению исследовалась на двухслойных молекулярных моделях ПТФЭ и Ф4К20, где верхний слой представлял модель исследуемого материала, а нижний слой состоял из атомов Fe. Поверхностное разрушение моделировалось путем отделения единичных молекул со свободной поверхности и из приповерхностной области моделей [11]. Молекулы отделялись вытягиванием нормально к границе раздела полимерный материал — Fe со скоростями  $v = 8 \text{ \AA/pс}$  и  $v = 10 \text{ \AA/pс}$ , в случае отделения молекул с поверхности ПТФЭ и Ф4К20, соответственно, а так же со скоростями  $v = 9 \text{ \AA/pс}$  и  $v = 45.5 \text{ \AA/pс}$  в случае отделения молекул из приповерхностной области исследуемых материалов, соответственно. Выбор скоростей вытягивания молекул определялся минимально возможными значениями, при которых происходило полное отделение единичных молекул от моделей исследуемых материалов. На рис. 2 приведены визуализации двухслойных молекулярных моделей.



**Рис. 2.** Двухслойные модели материалов с укрупненным масштабированием единичных молекул перед их отделением: (а), (б) — молекулы в поверхностной зоне моделей ПТФЭ и Ф4К20, соответственно; (в), (г) — молекулы в приповерхностной зоне моделей ПТФЭ и Ф4К20, соответственно.

лей исследуемых материалов, на которых укрупненным масштабированием отмечены единичные молекулы, занимающие различные исходные положения [11]. Необходимо отметить, что при отделении молекул с поверхности Ф4К20 в продуктах разрушения наблюдались только молекулы ПТФЭ, а в случае отделения молекул из приповерхностной зоны модели Ф4К20 дополнительно инициировалось отделение молекул литейного кокса. Результаты моделирования поверхностного разрушения подтверждаются данными триботехнических испытаний и микроскопического исследования продуктов разрушения Ф4К20 [18], в которых регистрировались микрочастицы литейного кокса, заполняющие впадины микронеровностей на рабочей поверхности контроллера и формирующие слой переноса, выглаживающий его поверхность. Таким образом, на поверхности контроллера может образовываться слой, приводящий к изменению пары трения. Наличием такого слоя, по-видимому, объясняется снижение коэффициента износа Ф4К20 при трении по стали, отмечаемое многими экспериментаторами.

Способность к изнашиванию исследуемых материалов на молекулярном уровне оценивалась по величине силы внутреннего трения при отделении молекул по выражению

$$F_f = \frac{\Delta E_K}{s}, \quad (12)$$

где  $\Delta E_K$  — изменение кинетической энергии отделяемой молекулы;  $s$  — расстояние перемещения отделяемой молекулы.

Изменение величины кинетической энергии молекул с учетом разницы в величинах скоростей молекул в начале и в конце отделения рассчитывалось по формуле

$$\Delta E_K = \frac{1}{2} m(v_1^2 - v_2^2), \quad (13)$$

где  $m$  — масса отделяемой молекулы, кг;  $v_1$  и  $v_2$  — исходная и конечная скорости отделения, соответственно, м/с.

**Таблица 2.** Значения сил внутреннего трения при отделении молекул с поверхности и из приповерхностного положения молекулярных моделей исследуемых материалов

	$F_f(10^{-8})$ , Н при отделении с поверхности	$F_f(10^{-8})$ , Н при отделении из приповерхностной области
ПТФЭ	2.38	2.78
Ф4К20	4.47	70.9

Из табл. 2 следует, что при отделении молекулы с поверхности Ф4К20 сила внутреннего трения приблизительно в 2 раза выше, чем в модели с ПТФЭ, а при отделении молекулы из приповерхностного слоя модели с Ф4К20 сила внутреннего трения приблизительно в 30 раз выше, чем в модели с ПТФЭ.

Для определения энергии сил межмолекулярного взаимодействия между отделяющей молекулой и остальными молекулами моделей использовалось выражение [11]

$$U^S_{inter} = U - U_m - U_{rest}, \quad (14)$$

где  $U$  — полная энергия модели;  $U_m$  — энергия вытягиваемой молекулы;  $U_{rest}$  — энергия модели без учета энергии вытягиваемых молекул.

Расчеты по (14) показали, что значение  $U^S_{inter}$  при отделении молекул с поверхности модели ПТФЭ уменьшалось с 36.46 до 2.33 ккал/моль, с поверхности модели Ф4К20 уменьшалось с 49.45 до 2.50 ккал/моль. При отделении молекулы из приповерхностного слоя модели ПТФЭ величина  $U^S_{inter}$  уменьшалась с 46.45 до 2.33 ккал/моль, а в модели Ф4К20 она снижалась с 60.64 до 2.50 ккал/моль. В результате по (14) получено, что средняя величина  $U^S_{inter}$  в модели с Ф4К20, более чем на 30% превышает этот показатель, определенный для модели с ПТФЭ.

Известно, что предпочтительным механизмом изнашивания полимерных материалов является адгезионный механизм изнашивания, для реализации которого необходимо не только возникновение, но и удержание слоев переноса на рабочей поверхности контртела [7, 18]. Для исследования влияния наполнителя на адгезионную способность слоев переноса к поверхности контртела были построены трехслойные модели ПТФЭ и Ф4К20, где средний слой являлся молекулярной моделью ПТФЭ или Ф4К20, размерами  $45.86 \times 45.86$  Å, и высотой 27.18 Å, а слои, расположенные справа и слева от среднего слоя, состояли из атомов Fe, размерами  $45.86 \times 45.86$  Å и высотой 17.57 Å. Моделирование трения скольжения осуществлялось за счет сдвига крайних слоев в противоположные стороны со скоростью 0.5 Å/пс. Адгезионная прочность слоев переноса к контртелу при сдвиге  $U_{inter}^{ad}$  определялась по средней величине энергии межмолекулярного взаимодействия на границе с Fe. На рис. 3 приведены варианты визуализаций трехслойных моделей ПТФЭ и Ф4К20 в результате относительного сдвига верхнего и нижнего слоев трехслойных моделей. Необходимо отметить, что практически на всех визуализациях наблюдалась практически равная концентрация молекул ПТФЭ.

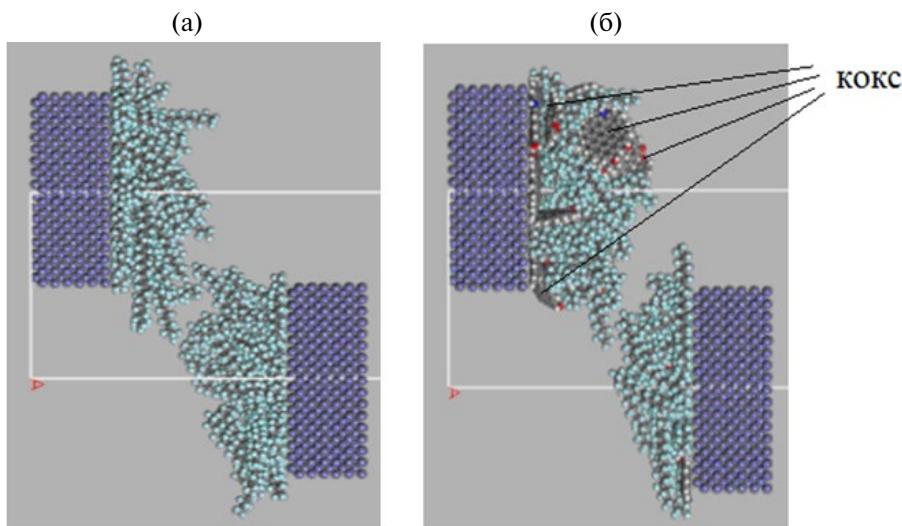


Рис. 3. Пример визуализации результатов моделирования трения ПТФЭ и Ф4К20 на трехслойных моделях: (а) — модель с ПТФЭ; (б) — модель с Ф4К20.

На рис. 3 хорошо заметны различия в концентрациях молекул ПТФЭ и Ф4К20 в направлении нормалей к поверхностям раздела слоев. Расчеты показали, что вблизи правой границы с Fe концентрация молекул ПТФЭ приблизительно в 2.5 раза выше по сравнению с Ф4К20 и молярная масса ПТФЭ в этой области приблизительно на 30% выше, чем его композита. Также получено, что средние скорости движения молекул в направлении сдвига в моделях ПТФЭ и Ф4К20 и составляют 0.052 и 0.045 Å/пс (5.2 м/с и 4.5 м/с), а значения  $U_{inter}^{ad}$  равны  $5.11E + 03$  и  $5.87E + 03$  ккал/моль, соответственно. Таким образом, можно предположить, что адгезионная прочность слоев переноса Ф4К20 к контртелу на 15% выше по сравнению с ПТФЭ.

В результате моделирования трения и изнашивания на примере молекулярных моделей ПТФЭ и Ф4К20 получено, что в присутствии наполнителя наблюдается повышение численных значений характеристик межмолекулярного взаимодей-

ствия  $U_{inter}^V$ ,  $U_{inter}^{ad}$  и  $U_{inter}^S$ , что, по-видимому, свидетельствует о стабилизации кинетического состояния молекул композита по сравнению с матрицей и согласуется с известным фактом повышения износостойкости Ф4К20 по сравнению с ПТФЭ. На рис. 4 приведены полученные значения  $U_{inter}^V$ ,  $U_{inter}^{ad}$  и  $U_{inter}^S$  и интенсивности линейного изнашивания  $I_h$ . Данные по  $I_h$  были получены в результате экспериментального исследования износостойкости этих материалов при произведении контактного давления  $p$  и скорости скольжения  $v$  равном 1.01 МПа м/с [7].

Из рис. 4 следует, что наиболее заметное различие в численных значениях, имеет параметр  $U_{inter}^V$ , определенный для моделей ПТФЭ и Ф4К20. Тогда удобно принять в качестве критерия, чувствительного к износу на молекулярном уровне, величину  $U_{inter}^V$ , при этом в качестве дополнительного параметра для характеристики самосмазывающих свойств полимерных материалов следует использовать величину  $U_{inter}^{ad}$ .

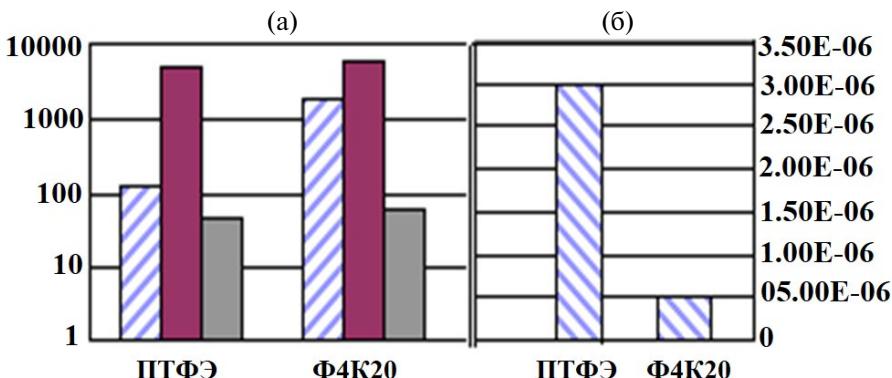


Рис. 4. Влияние наполнителя из литейного кокса на величины:

(а) —  $\log U_{inter}^V$  — ,  $\log U_{inter}^{ad}$  — ,  $\log U_{inter}^S$  — , ккал/моль; (б) —  $I_h$  — .

**Выводы. 1.** Проведено молекулярное моделирование структур ПТФЭ и Ф4К20. **2.** Определены численные значения модулей сдвига и энергий межмолекулярного взаимодействия моделей ПТФЭ и Ф4К20. **3.** По результатам сравнительного анализа величин энергий межмолекулярного взаимодействия моделей ПТФЭ и Ф4К20 с интенсивностью линейного изнашивания предложено в качестве критерия, чувствительного к износу на молекулярном уровне, использовать величину объемной энергии межмолекулярного взаимодействия  $U_{inter}^V$ , а в качестве дополнительного критерия использовать энергию межмолекулярных связей между слоем переноса и контртелом,  $U_{inter}^{ad}$ . **4.** Показана возможность применения теории молекулярной динамики для оценки износостойкости полимерных композитов по сравнению с исходной матрицей.

**Финансирование работы.** Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мыскин Н. К. Об эффекте масштабного синергизма дисперсного наполнения в улучшении триботехнических характеристик полимерных композитов //Полимерные материалы и технологии. 2023. Т. 9. № 2. С. 5.
2. Bhargava S., Makowiec M. E., and Blanchet T. A. Wear Reduction Mechanisms within Highly Wear-Resistant Graphene and Other Carbon-Filled PTFE Nanocomposites // Wear. 2020. V. 444. 203163.

3. Кисель Ю. Е., Кравченко И. Н., Купреенко А. И. и др. Влияние прочности компонентов композиционных материалов на их физико-механические свойства // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2021. № 6. С. 43–51.
4. Vasilev A. P., Struchkova T. S., Nikiforov L. A., Okhlopkova A. A., Grakovitch P. N., Shim E. L. and Cho J. H. Mechanical and Tribological Properties of Polytetrafluoroethylene Composites with Carbon Fiber and Layered Silicate Fillers // Molecules. 2019. V. 24. № 2. P. 224.
5. Слепцова С. А., Лазарева Н. Н., Федосеева В. И., Капитонова Ю. В., Охлопкова А. А. Влияние катионов металлов механоактивированного бентонита на триботехнические процессы в ПТФЭ // Трение и износ. 2018. Т. 39. № 6. С. 604–611.
6. Данилова С. Н., Дьяконов А. В., Васильев А. П., Герасимова Ю. С., Охлопкова А. А., Слепцова С. А. Исследование триботехнических свойств сверхвысокомолекулярного полиэтилена, наполненного серой, дифенилгидуанидином и 2-меркапто-бензиазолом // Вопросы материаловедения. 2019. № 3 (99). С. 91–98.
7. Sedakova E. B., Kozyrev Yu. P. Using the wear model of polymer composites based on polytetrafluoroethylene to determine the filling efficiency of matrix // In book: Mechanics and Control of Solids and Structures. Advanced Structured Materials / Eds. V.A. Polyanskiy, A. K. Belyaev. Springer, Cham. 2022. 646 p. Chapter 27. P. 573–588.
8. Chawla R., Sharma S. A molecular dynamics study on Young's modulus and tribology of carbon nanotube reinforced styrene-butadiene rubber // J. of Molecular Modeling. 2018. V. 24 (4). P. 1–9.
9. He E., Wang S., Li Y. et al. Enhanced tribological properties of polymer composites by incorporation of nano-SiO<sub>2</sub> particles: a molecular dynamics simulation study // Computational Materials Science. 2017. V. 134. P. 93–99.
10. Wang B., Zhang K., Zhou C., Ren M., Gu Y., Li T. Engineering the mechanical properties of CNT-PEEK nanocomposites // The Royal Society of Chemistry. 2019. V. 9 (23). P. 12836–12845.
11. Ли С. Методика оценки износостойкости полимерных нанокомпозиционных покрытий. Автореферат на соискание ученой степени кандидата технических наук. СПб.: Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, 2023. 18 с.
12. Lin F., Xiang Y., Shen H. S. Temperature Dependent Mechanical Properties of Graphene Reinforced Polymer Nanocomposites. A Molecular Dynamics Simulation // Compos. Part B Eng. 2017. V. 111. P. 261–269.
13. 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. V. 115. P. 694–700.
14. Huai Sun, Zhao Jin, Chunwei Yang, Reinier L. C. Akkermans, Struan H. Robertson, Neil A. Spenley, Simon Miller, Stephen M. Todd. COMPASSII: extended coverage for polymer and drug-like molecule databases // J. of Molecular Modeling. 2016. V. 22. P. 1–10.
15. Subramaniyan A. K., Sun C. T. Continuum interpretation of virial stress in molecular simulations // Int. J. of Solids and Structures. 2008. V. 45 (14–15). P. 4340–4346.
16. Swope W., Andersen H., Berens P. et al. A computer-simulation method for the calculation of equilibrium-constants for the formation of physical clusters of molecules-application to small water clusters // The Journal of Chemical Physics. 1982. V. 76 (1). P. 637–649.
17. Nye J. F. Physical Properties of Crystals. Clarendon: Oxford, 1957. 350 p.
18. Blanched T. A., Kennedy F. E. Sliding wear mechanism of polytetrafluoroethylene (PTFE) and PTFE composites // Wear. 1992. V. 153 (1). P. 229–243.