

Центральноукраїнський національний технічний університет
Механіко-технологічний факультет
Кафедра Матеріалознавства та ливарного виробництва

«Допущено до захисту»
Завідувач кафедри М та ЛВ
канд. техн. наук, доцент
_____ Олександр КУЗИК
« ____ » _____ 2026 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА
за першим (бакалаврським) рівнем вищої освіти на тему:

**«Моделювання зносостійкості композитів,
армованих графеном»**

Виконав здобувач вищої освіти 4-го курсу,
групи МЗ-23мб
ОПП «Прикладне матеріалознавство та
інжиніринг»
спеціальності 132 «Матеріалознавство»
_____ Богдан ПАВЛОВ

Керівник роботи канд. техн. наук, доцент
_____ Юрій КОВАЛЬОВ
« ____ » _____ 20__ р.

Рецензент:

_____ 20__ р.

Центральноукраїнський національний технічний університет
 Факультет _____ Механіко-технологічний
 Кафедра _____ Матеріалознавства та ливарного виробництва
 Рівень вищої освіти _____ перший (бакалаврський)
 Галузь знань _____ 13 Механічна інженерія
 Спеціальність _____ 132 Матеріалознавство
 Освітньо-професійна
 програма _____ Прикладне матеріалознавство та інжиніринг

ЗАТВЕРДЖУЮ
 Завідувач кафедри М та ЛВ
 _____ Олександр КУЗИК
 «_____» _____ 20____ р.

ЗАВДАННЯ НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ
 ЗА ПЕРШИМ (БАКАЛАВРСЬКИМ) РІВНЕМ ВИЩОЇ ОСВІТИ
 ЗДОБУВАЧА ВИЩОЇ ОСВІТИ

Павлова Богдана Олександровича

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи: Моделювання зносостійкості композитів, армованих графеном
 2. Керівник роботи: кандидат технічних наук, доцент Юрій Григорович Ковальов
 3. Строк подання роботи до захисту: 20 травня 2026 р.
 4. Мета та завдання випускної кваліфікаційної роботи: розробити та верифікувати розрахункову модель зносостійкості полімерних і металевих матриць, армованих графеновими нанопластинками, з використанням методів молекулярної динаміки
- Завдання:
1. Проаналізувати механізми зносу в нанокompозитах і сучасні підходи до їхнього моделювання.
 2. Розробити молекулярно-динамічну модель системи «матриця / графеновий нанопластик / контртіло» для двох типів матриць – поліетилену та алюмінієвого сплаву Al6061.
 3. Дослідити вплив вмісту (0-6 мас.%) та орієнтації графенових нанопластинок на коефіцієнт тертя і швидкість зношування.
 4. Верифікувати результати розрахунку методом молекулярної динаміки шляхом порівняння з моделлю Archard та даними літератури.
 5. Сформулювати рекомендації щодо оптимального складу нанокompозиту для триботехнічних застосувань.

5. Консультанти по роботі, із зазначенням розділів

Розділ	Консультант	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв
Вступ	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 1. Огляд літературних даних	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 2. Розробка методології дослідження	Ковальов Ю.Г.		
Розділ 3. Результати та обговорення	Ковальов Ю.Г.		

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів роботи	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1.	Патентний огляд		
2.	Огляд літературних джерел		
3.	Матеріали та методи дослідження		
4.	Розробка і навчання моделей прогнозування		
5.	Оформлення пояснювальної записки		
6.	Оформлення презентації роботи		
7.	Здача роботи на кафедру та перевірка наявності запозичень		

Дата видачі завдання «_____» _____ 20__ р.

Керівник роботи _____ Юрій КОВАЛЬОВ

(підпис)

Завдання прийнято до виконання «_____» _____ 20__ р.

Здобувач вищої освіти _____

_____ Богдан ПАВЛОВ

(підпис)

Центральноукраїнський національний технічний університет
Механіко-технологічний факультет
Кафедра матеріалознавства та ливарного виробництва

ПОЯСНЮВАЛЬНА ЗАПИСКА

до кваліфікаційної роботи на тему:

**МОДЕЛЮВАННЯ ЗНОСОСТІЙКОСТІ КОМПОЗИТІВ, АРМОВАНИХ
ГРАФЕНОМ**

Виконав здобувач вищої освіти

4-го курсу, групи МЗ-23мб

ОПП «Прикладне матеріалознавство та інжиніринг»

спеціальності 132 «Матеріалознавство»

_____ Богдан ПАВЛОВ

Керівник роботи:

канд. техн. наук, доцент

_____ Юрій КОВАЛЬОВ

Кропивницький 2026

АНОТАЦІЯ

Відомості про обсяг роботи: пояснювальна записка містить 40 сторінок, 6 ілюстрацій, 6 таблиць. Список використаних джерел 35 найменувань.

Кваліфікаційна робота присвячена розробці та верифікації розрахункової моделі зносостійкості полімерних і металевих матриць, армованих графеновими нанопластинками (ГНП). Об'єкт дослідження – трибологічний контакт у нанокompозитних системах «матриця (ПЕ або Al6061) / ГНП / алмазне контртіло». Предмет дослідження – залежності коефіцієнта тертя і швидкості зношування від вмісту, орієнтації й функціоналізації ГНП. Методи дослідження: молекулярна динаміка (пакет LAMMPS), метод Archard, порівняльний аналіз із трибологічними даними літератури.

Метою роботи є розробити та верифікувати розрахункову модель зносостійкості полімерних і металевих матриць, армованих графеновими нанопластинками, з використанням методів молекулярної динаміки.

У пояснювальній записці наведено наступні результати: побудовано молекулярно-динамічну модель тривимірної системи «матриця / ГНП / алмазне контртіло» для двох типів матриць – поліетилену (ПЕ) та алюмінію (Al6061); проведено систематичні симуляції при вмісті ГНП 0–6 мас.% та трьох орієнтаціях нанопластинок; встановлено, що введення 3 мас.% ГНП з горизонтальною орієнтацією знижує швидкість зношування Al6061 у 2,3 рази, а коефіцієнт тертя – на 34%; виконано порівняння з аналітичною моделлю Archard та опублікованими трибологічними даними; сформульовано практичні рекомендації щодо вибору вмісту та орієнтації ГНП для конструкційних і триботехнічних застосувань.

Дослідження виконувалося в межах ДіР (ДРН 0125U004330) та ДіР (0125U004331).

МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА, НАНОКОМПОЗИТ, ЗНОСОСТІЙКІСТЬ,
МОДЕЛЮВАННЯ, КОЕФІЦІЄНТ ТЕРТЯ

ABSTRACT

Scope of work: the explanatory note comprises 40 pages, 6 illustrations, 6 tables, and a list of 35 references.

The qualification thesis is devoted to the development and verification of a computational wear resistance model for polymer and metal matrices reinforced with graphene nanoplatelets (GNP). The object of study is the tribological contact in nanocomposite systems «matrix (PE or Al6061) / GNP / diamond counterbody». The subject of study is the dependences of the friction coefficient and wear rate on GNP content, orientation, and functionalization. Research methods include molecular dynamics (LAMMPS package), the Archard model, and comparative analysis with tribological data from the literature.

The aim of the work is to develop and verify a computational wear resistance model for polymer and metal matrices reinforced with graphene nanoplatelets using molecular dynamics methods.

The following results are presented in the explanatory note: a molecular dynamics model of the three-dimensional «matrix / GNP / diamond counterbody» system was constructed for two matrix types – polyethylene (PE) and aluminium alloy Al6061; systematic simulations were carried out at GNP contents of 0-6 wt.% and three nanoplatelet orientations; it was established that the addition of 3 wt.% GNP with horizontal orientation reduces the wear rate of Al6061 by a factor of 2.3 and the friction coefficient by 34%; a comparison with the analytical Archard model and published tribological data was performed; practical recommendations on the selection of GNP content and orientation for structural and tribotechnical applications were formulated.

The research was carried out within the framework of R&D projects (state registration numbers 0125U004330 and 0125U004331).

MOLECULAR DYNAMICS, NANOCOMPOSITE, WEAR RESISTANCE,
MODELLING, FRICTION COEFFICIENT

ЗМІСТ

СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	9
ВСТУП	10
РОЗДІЛ 1 ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	12
1.1 Графенові нанопластинки: структура та властивості	12
1.2 Механізми зносу в нанокompозитах	13
1.3 Сучасні підходи до моделювання трибологічних систем	15
1.3.1 Загальна класифікація методів моделювання	15
1.3.2 Молекулярна динаміка	17
1.3.3 Метод скінченних елементів і граничних елементів	19
1.3.4 Феноменологічні моделі зносу	21
1.3.5 Мультимасштабне моделювання	22
1.3.6 Огляд МД-досліджень нанокompозитів з ГНП	23
РОЗДІЛ 2 МЕТОДОЛОГІЯ МОДЕЛЮВАННЯ	26
2.1 Геометрія розрахункової комірки та початкова конфігурація	26
2.1.1 Структура симуляційної комірки	26
2.1.2 Молекулярно-динамічний протокол	26
2.2 Силкові поля та параметри потенціалів	27
2.3 Обчислення трибологічних характеристик	27
2.4 Попередній кореляційний аналіз даних	28
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ	29
3.1 Вплив вмісту ГНП на коефіцієнт тертя	29
3.2 Вплив вмісту ГНП на швидкість зношування	30
3.3 Мікроструктурний аналіз зони контакту	31
РОЗДІЛ 4 ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛІ ТА ПРАКТИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ	33
4.1 Зіставлення з моделлю Archard	33

	8
4.3 Практичні рекомендації щодо проектування нанокомпозитів	34
4.3.1 Рекомендований вміст ГНП	34
4.3.2 Вимоги до орієнтації та функціоналізації	34
4.3.3 Вибір типу матриці	35
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ	36
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	38

СПИСОК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ГНП	–	графенові нанопластинки (graphene nanoplatelets, GNP)
МД	–	молекулярна динаміка
ПЕ	–	поліетилен високої густини (HDPE)
КОФ	–	коефіцієнт тертя (coefficient of friction, CoF)
ШЗ	–	швидкість зношування (wear rate)
AIREBO	–	Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (силове поле)
EAM	–	Embedded Atom Method (метод вбудованого атома)
OPLS	–	Optimized Potentials for Liquid Simulations
ReaxFF	–	Reactive Force Field
NVT	–	термостатичний ансамбль
NPT	–	ізотермо-ізобарний ансамбль
LAMMPS	–	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
VMD	–	Visual Molecular Dynamics (програма візуалізації)
DFT	–	теорія функціоналу густини
RDF	–	функція радіального розподілу
MSD	–	середньоквадратичне зміщення
K	–	константа зносу Archard
H	–	твердість матеріалу
W	–	навантаження на контртіло
L	–	шлях тертя

ВСТУП

Актуальність теми. Підвищення зносостійкості конструкційних матеріалів є одним із ключових завдань сучасного матеріалознавства. Зношування призводить до значних економічних втрат: за різними оцінками, від 1 до 4% ВВП розвинених країн витрачається на ремонт і заміну деталей, що зазнали триботехнічного руйнування. Традиційні методи підвищення зносостійкості, такі як: термічна обробка, нанесення покриттів, легування тощо, мають свої технологічні та економічні обмеження.

Упродовж останнього десятиріччя привертають увагу нанокompозити, армовані графеновими нанопластинками (ГНП). Завдяки унікальному поєднанню механічних, теплових і трибологічних властивостей ГНП (модуль Юнга ≈ 1 ТПа, твердість $\sim 0,3$ ТПа, коефіцієнт тертя f (КОФ) менше 0,1) їхнє введення навіть у невеликих концентраціях (1-6 мас.%) суттєво знижує коефіцієнт тертя і швидкість зношування матриць різної природи. Проте оптимальний вміст і орієнтація ГНП для конкретних триботехнічних умов залишаються предметом досліджень.

Перехід від емпіричних випробувань до комп'ютерного моделювання дозволяє значно скоротити обсяг натурних експериментів. Молекулярна динаміка (МД) надає можливість безпосередньо спостерігати атомарні механізми зносу: ковзання шарів, утворення і розрив зв'язків, передачу тепла і кількісно оцінювати трибологічні характеристики у функції складу та мікроструктури матеріалу.

Мета роботи – розробити та верифікувати розрахункову моделі зносостійкості полімерних і металевих матриць, армованих графеновими нанопластинками, з використанням методів молекулярної динаміки.

Для досягнення поставленої мети вирішувалися такі завдання:

1. Проаналізувати механізми зносу в нанокompозитах і сучасні підходи до їхнього моделювання.

2. Розробити МД-модель системи «матриця/ГНП/контртіло» для двох типів матриць: поліетилену (ПЕ) та алюмінієвого сплаву Al6061.

3. Дослідити вплив вмісту (0-6 мас.%) та орієнтації ГНП на коефіцієнт тертя і швидкість зношування.

4. Верифікувати результати МД шляхом порівняння з моделлю Archard та даними літератури.

5. Сформулювати рекомендації щодо оптимального складу нанокompозиту для триботехнічних застосувань.

Об'єкт дослідження – трибологічний контакт у нанокompозитних системах «матриця (ПЕ або Al6061) / ГНП / алмазне контртіло».

Предмет дослідження – залежності коефіцієнта тертя і швидкості зношування від вмісту, орієнтації й функціоналізації ГНП.

Методи дослідження: молекулярна динаміка (пакет LAMMPS), метод Archard, порівняльний аналіз із трибологічними даними літератури.

Наукова новизна. Вперше проведено систематичне МД-моделювання трибологічних характеристик нанокompозитів ПЕ/ГНП і Al6061/ГНП в єдиній методологічній рамці, що дозволяє безпосередньо порівняти вплив природи матриці на ефективність ГНП як трибологічного модифікатора.

Практичне значення. Отримані розрахункові залежності коефіцієнта тертя і швидкості зношування від вмісту ГНП можуть бути використані як первинний орієнтир при проектуванні нанокompозитних підшипників ковзання, гальмівних колодок і деталей насосного обладнання без проведення повного циклу натурних трибологічних випробувань.

Галузь застосування: машинобудування, автомобілебудування, медицина, харчова промисловість, тощо.

Взаємозв'язок з іншими роботами: Дослідження виконувалося в межах ДіР (ДРН 0125U004330) та ДіР (0125U004331).

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1 Графенові нанопластинки: структура та властивості

Графен – одношарова кристалічна решітка атомів вуглецю, впакованих у гексагональну структуру з міжатомною відстанню 0,142 нм. Структурно він являє собою крайній випадок графіту, в якому окремі вуглецеві шари пов'язані між собою слабкими ван-дер-ваальсовими взаємодіями з енергією ~ 2 мДж/м². ГНП є проміжним об'єктом між монографеном і мікрокристалічним графітом: вони складаються з 2-100 шарів і мають латеральний розмір від 1 мкм до 25 мкм та товщину від 5 нм до 50 нм.

Електронна структура графену визначається sp²-гібридизацією атомів вуглецю: три σ -зв'язки формують плоский каркас, тоді як ненаправлені π -електрони обумовлюють надзвичайно високу рухливість носіїв заряду до 200 000 см²/(В·с) при кімнатній температурі, що перевищує значення для кремнію в 140 разів. Механічні властивості визначаються жорсткістю sp²-решітки: модуль пружності графену становить ~ 1 ТПа, межа міцності на розрив ~ 130 ТПа, що робить його найміцнішим відомим матеріалом.

Для трибологічних застосувань принципово важливою є здатність графенових шарів до взаємного ковзання з надзвичайно низьким опором завдяки мізерній адгезії між шарами. Це явище, відоме як структурне мастило (superlubricity), досягається за відповідних кристалографічних орієнтацій та навантажень. Коефіцієнт тертя монографену на SiO₂ складає $\sim 0,03$ - $0,06$, тоді як для ГНП типові значення КОФ рівні $0,05$ - $0,15$, залежно від числа шарів і стану поверхні.

ГНП синтезують кількома методами. Хімічне злушення із природного графіту дозволяє отримати великі кількості матеріалу з широким розподілом за числом шарів, але характеризується певним дефектоутворенням. Хімічне

осадження з газової фази (CVD) забезпечує строго контрольоване число шарів, але є складнішим і дорожчим процесом. Відновлення оксиду графену дозволяє синтезувати функціоналізовані ГНП з кисневмісними групами на поверхні (рис. 1.1) [2].

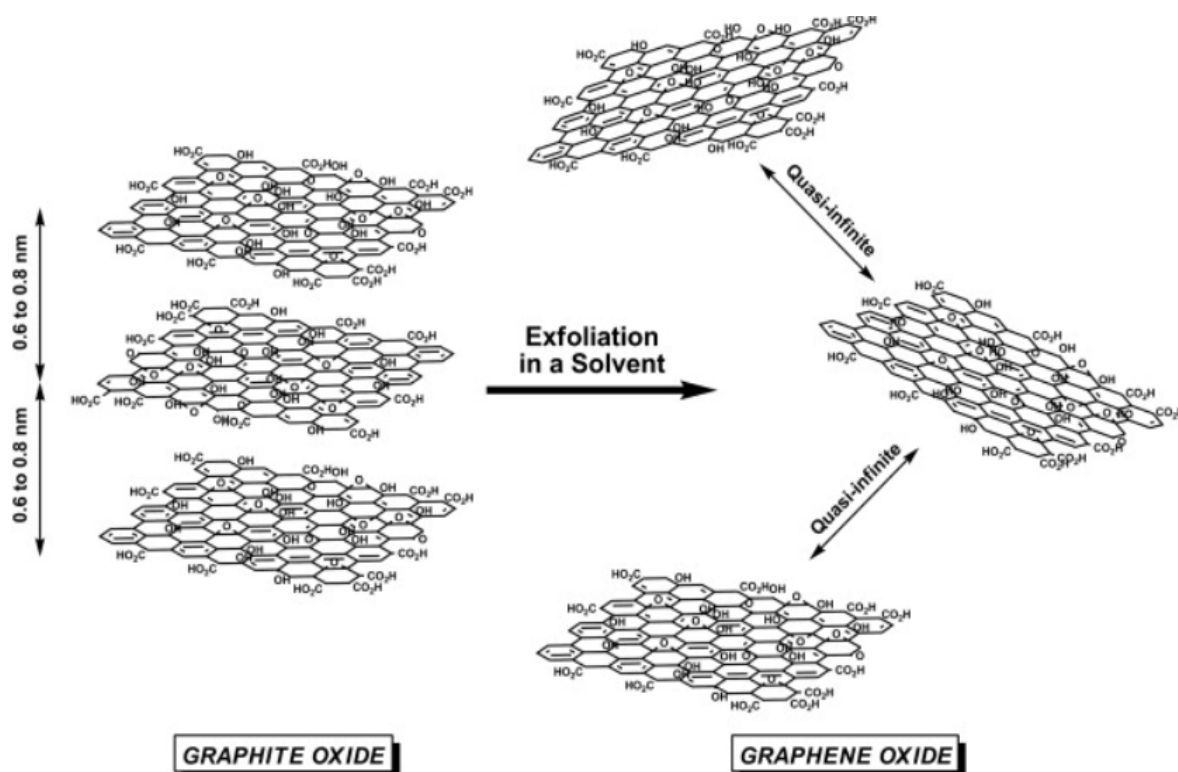


Рисунок 1.1 – Хімічну структуру оксиду графіту. [2]

Функціоналізація поверхні ГНП суттєво впливає на їх трибологічну поведінку. Гідроксильні (-OH) та епоксидні (-O-) групи підвищують гідрофільність і сумісність з полярними матрицями, але можуть дещо знижувати змащувальну дію. Карбоксильні (-COOH) групи покращують диспергованість у розплавах і порошкових сумішах. Аміногрупи (-NH₂) сприяють ковалентному зв'язку з матрицями на основі епоксидних смол.

1.2 Механізми зносу в нанокompозитах

Знос – процес поступового руйнування поверхневого шару матеріалу під дією механічних, теплових і хімічних чинників при відносному переміщенні тіл

у контактi. Вiдповiдно до класифiкацiї ISO 15243 та ASTM G40, розрiзняють такi основнi механiзми зносу: адгезiйний, абразивний, втомний, корозiйний та ерозiйний.

Адгезiйний знос виникає внаслiдок утворення i розриву адгезiйних мiсткiв мiж ювенiльними поверхнями при мiкроконтактi. При ковзаннi виступiв (мiкронерiвностей) двох поверхонь один по одному локальний тиск у зонах контакту може перевищувати твердiсть матерiалу в 10-100 разiв. Це призводить до пластичної деформацiї, злипання (холодного зварювання) i подальшого вiдриву фрагментiв матерiалу. Введення ГНП знижує адгезiйний знос завдяки трьом ефектам:

1. Збiльшенню твердостi матрицi;
2. Створенню захисної трiщинки з низькоенергетичного графенового шару на поверхнi;
3. Зменшенню реальної площi контакту.

Абразивний знос зумовлений механiчним видаленням матерiалу твердими частинками або виступами бiльш твердого контртіла. Розрiзняють двотiльний абразивний знос (тертя мiж двома поверхнями) i тритiльний (наявнiсть абразивних частинок мiж поверхнями). В нанокompозитах ГНП можуть виконувати подвiйну роль: дрiбнi частинки ГНП, що вiдшаровуються в процесi зносу, утворюють тонкий трибофiльм мiж поверхнями, функцiонуючи як твердий змашувальний матерiал.

Втомний знос вiдбувається при циклiчному навантаженнi в умовах контактного тиску, що викликає зародження i поширення мiкротрiщин. Субповерхневі напруги призводять до утворення трiщин на певнiй глибинi вiд поверхнi, якi поступово виходять на поверхню, утворюючи пластiвцеподiбнi фрагменти зносу. ГНП гальмують поширення трiщин завдяки механiзму мостикоутворення: пластинки, що перекривають берега трiщини, поглинають енергiю деформування.

Корозiйний знос є результатом синергiї механiчного зношування та хiмiчної атаки навколишнього середовища. У металевих матрицях (Al6061) цей

механізм реалізується через утворення оксидних плівок, які руйнуються при терті, оголюючи свіжі металеві поверхні. ГНП здатні сповільнювати корозійні процеси, утворюючи бар'єрний шар, що перешкоджає дифузії кисню та вологи.

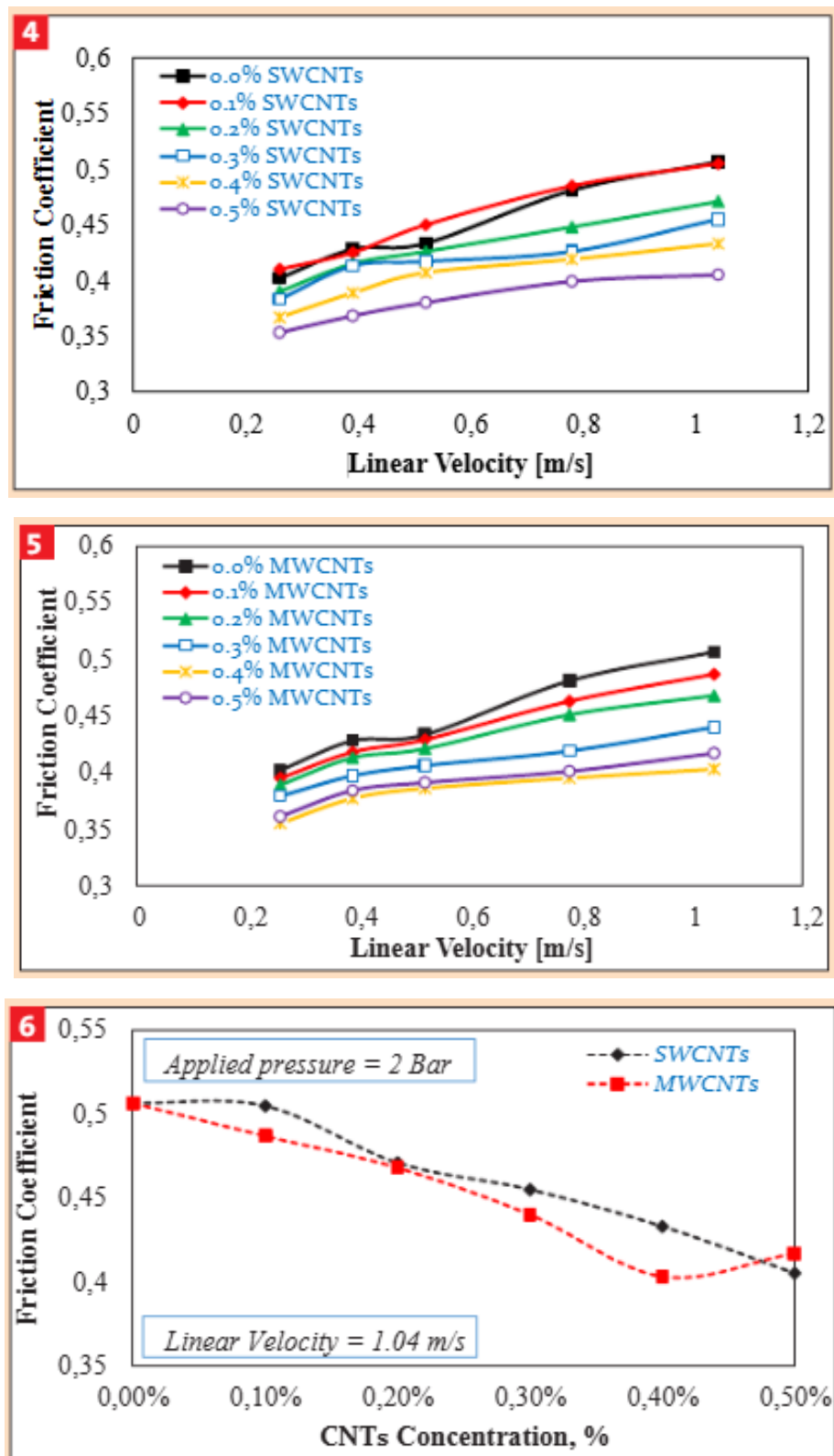
Встановлено, що залежність КОФ і ШЗ від вмісту ГНП має нелінійний характер з оптимумом у діапазоні 1-4 мас.% залежно від природи матриці. При низьких концентраціях ГНП нерівномірно розподіляються в матриці, і їхній вплив обмежений. При оптимальному вмісті утворюється перколяційна мережа частинок, що забезпечує рівномірне розподілення навантаження і формування суцільного трибофільму. При надмірному вмісті ГНП агломеруються, стаючи ініціаторами тріщин і підвищуючи знос.

Важливою характеристикою є орієнтація ГНП відносно поверхні тертя. Пластинки, орієнтовані паралельно поверхні ковзання, утворюють ефективне шарове мастило з мінімальним опором зсуву. Перпендикулярна орієнтація підвищує зносостійкість завдяки армуванню матриці, але менш ефективна для зниження КОФ. Довільна орієнтація є компромісом між двома крайніми випадками.

1.3 Сучасні підходи до моделювання трибологічних систем

1.3.1 Загальна класифікація методів моделювання

Моделювання трибологічних процесів охоплює широкий діапазон просторових і часових масштабів – від ангстремів і пікосекунд (атомарний рівень) до міліметрів і годин (макроскопічний рівень). Вибір методу моделювання визначається конкретним завданням і доступними обчислювальними ресурсами. Жоден з існуючих підходів не охоплює весь діапазон масштабів одночасно, тому сучасна трибологія тяжіє до ієрархічних (мультимасштабних) стратегій моделювання (див. рисунок 1.2).

Рисунок 1.2 – Коефіцієнт тертя f залежно від вмісту та орієнтації ГНП

[35]

На атомарному рівні (1-100 нм, 0,001-10 нс) основним інструментом є молекулярна динаміка (МД) та метод Монте-Карло (МК). На мікрорівні (100 - 100 мкм, 10 нс - 1 мкс) застосовуються дискретні елементи (DEM) і мезомасштабні моделі. На макрорівні (>100 мкм, >1 мс) використовуються метод скінченних елементів (FEM), метод граничних елементів (BEM) і феноменологічні моделі зносу (Archard, Holm та ін.). Схему масштабної ієрархії наведено на рис. 1.3.

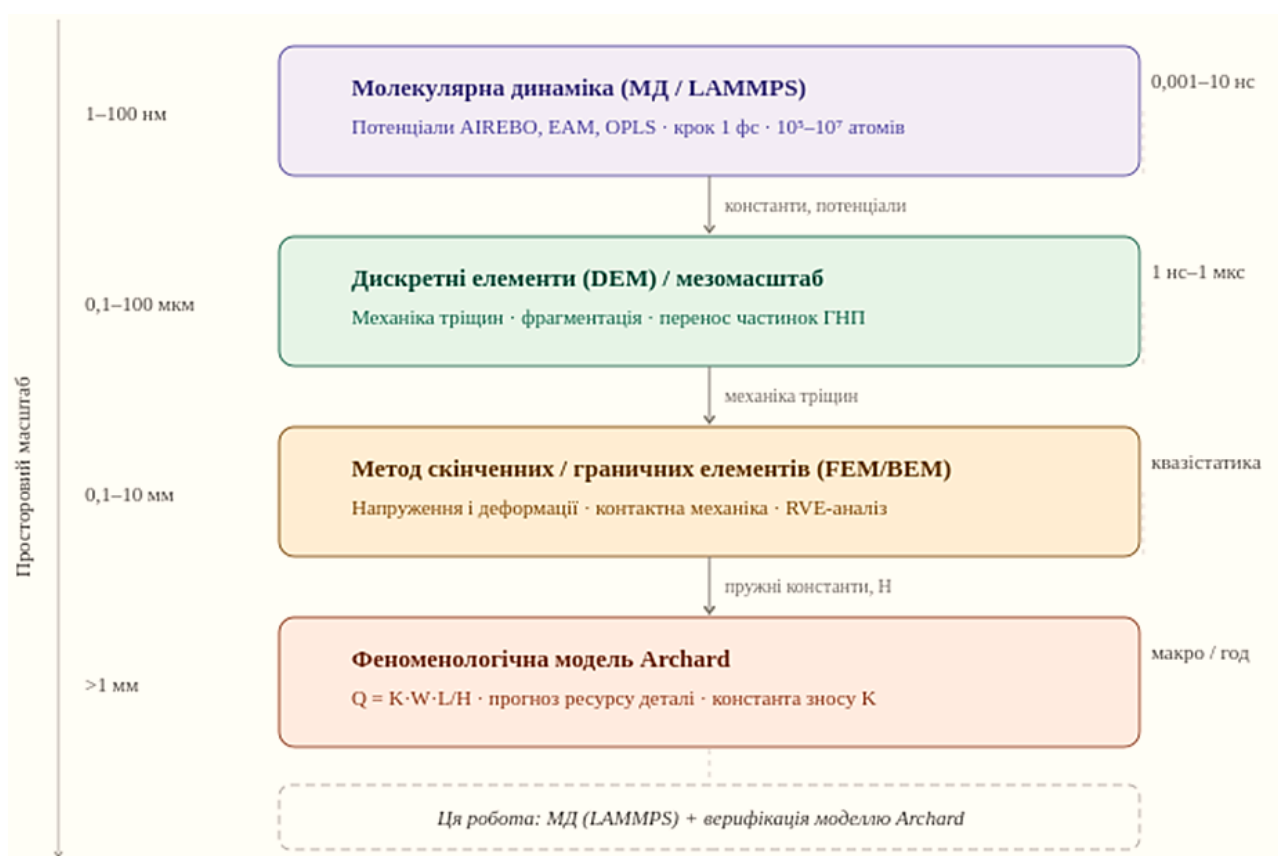


Рисунок 1.3 – Схему масштабної ієрархії методів

1.3.2 Молекулярна динаміка

Молекулярна динаміка (МД) є основним інструментом для дослідження атомарних механізмів тертя і зносу. МД-симуляція розв'язує рівняння руху Ньютона для кожного атома системи:

$$m_i \cdot \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\nabla_i U(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (1.1)$$

де m_i – маса i -го атома, r_i – його координата, U – повна потенціальна енергія системи. Просторовий масштаб типових МД-розрахунків тертя – 5-50 нм, часовий – 1-10 нс.

Ключова перевага МД – можливість безпосередньо спостерігати атомарні механізми: утворення і розрив зв'язків, перенесення матеріалу, нагрів зони тертя, дифузію атомів мастильного матеріалу. Основним обмеженням є малий просторовий і часовий масштаб, що не дозволяє безпосередньо моделювати макроскопічний знос.

Алгоритм інтегрування рівнянь руху. Найпоширенішим алгоритмом інтегрування в МД-трибології є алгоритм Верле у формі «velocity-Verlet»:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t) \cdot \Delta t + a_i(t) \cdot \frac{(\Delta t)^2}{2}, \quad (1.2)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{\Delta t}{2} \cdot (a_i(t + \Delta t) + a_i(t)). \quad (1.3)$$

Крок інтегрування Δt зазвичай вибирається у діапазоні 0,5–2 фс (фемтосекунди), що приблизно на порядок менше характерного часу коливань хімічного зв'язку (~ 10 фс). Менший крок підвищує точність, але збільшує обчислювальні витрати; більший крок може призвести до нестійкості інтегрування.

У реальних трибологічних умовах при терті виділяється тепло, яке відводиться від зони контакту. В МД-симуляціях для підтримання постійної температури системи використовуються термостати. Термостат Нозе-Хувера є найбільш фізично коректним: він моделює зв'язок системи з тепловим резервуаром через додаткову термостатну змінну ζ , що входить до рівнянь руху. Альтернативою є термостат Берендсена (простіший, але порушує канонічний ансамбль) та термостат Ланжевена (добре відтворює броунівський рух). У трибологічних МД-симуляціях термостат зазвичай застосовується лише до атомів матриці, тоді як зона контакту залишається термодинамічно вільною – це

дозволяє коректно відтворити локальний нагрів при терті.

Якість МД-розрахунку цілком визначається точністю потенціалів міжатомної взаємодії (силових полів). Для вуглецевих структур (ГНП, алмаз) застосовують реакційні потенціали AIREBO або ReaxFF, що коректно описують утворення і розрив С–С зв'язків. Для металів – потенціали вбудованого атома (EAM, MEAM), що враховують багаточастинкову природу металевого зв'язку. Для полімерів – класичні молекулярно-механічні поля OPLS, AMBER, CHARMM.

За даними огляду Dong та ін. [33], МД-моделювання трибологічних процесів розвивається за трьома напрямками:

- 1) фундаментальні дослідження механізмів тертя на атомарному рівні (AFM-подібні симуляції),
- 2) моделювання зносу і переносу матеріалу при контакті,
- 3) дослідження мастильних матеріалів і граничного мащення. Для нанокompatитів з ГНП МД дозволяє безпосередньо відповісти на питання: яка концентрація ГНП оптимальна, яка орієнтація ефективніша, як функціоналізація впливає на мастильний шар.

1.3.3 Метод скінченних елементів і граничних елементів

Метод скінченних елементів (FEM) і граничних елементів (BEM) застосовуються для розв'язання задач контактної механіки на мікро- і макромасштабах. Ці методи добре підходять для розрахунку розподілу напружень і деформацій у зоні контакту, але не враховують атомарних механізмів і вимагають феноменологічних законів тертя та зносу як вхідних даних.

У FEM-підході область контакту дискретизується на скінченні елементи, і для кожного елемента розв'язуються рівняння рівноваги. Для трибологічних задач особливо важливе коректне задання граничних умов контакту: умови непроникнення, закону Кулона для тертя ковзання, умов адгезії. Сучасні FEM-пакети (Abaqus, ANSYS, MSC.Marc) мають спеціалізовані модулі для

контактного аналізу з урахуванням великих деформацій і нелінійності матеріалу.

ВЕМ є більш ефективним для задач з великою площею вільної поверхні, оскільки потребує дискретизації лише границі тіла, а не його об'єму. Метод широко використовується для розрахунку контактної тиску при взаємодії шорстких поверхонь (модель Грінвуда-Вільямсона та її похідні). Головне обмеження ВЕМ – труднощі з моделюванням нелінійних і неоднорідних матеріалів.

Для нанокompозитів FEM/ВЕМ застосовуються на мезорівні: визначення ефективних пружних констант нанокompозиту методом репрезентативного елементарного об'єму (RVE), моделювання напружено-деформованого стану навколо ГНП, оцінка впливу агломерації наповнювача на механічні властивості.

Таблиця 1.1 – Порівняння методів моделювання трибологічних систем

Метод	Просторовий масштаб	Часовий масштаб	Переваги	Обмеження
МД	1–100 нм	0,001–10 нс	Атомарні механізми, прямий розрахунок КОФ	Малі масштаби, висока швидкість ковзання
DEM	100 нм–1 мм	1 нс–1 мс	Механіка тріщин, фрагментація	Потрібні контактні закони
FEM/ ВЕМ	1 мкм–1 м	Квазістатика	Реальні геометрії та навантаження	Феноменологічні закони тертя
Archard	Макро	Макро	Простота, верифікація	Немає мікроструктури
Multiscale	Всі	Всі	Повна ієрархія	Складна реалізація

1.3.4 Феноменологічні моделі зносу

Механістичні моделі зносу описують процес зношування на макрорівні через емпіричні або напівемпіричні залежності без урахування атомарних механізмів. Найпоширенішою є модель Archard.

Закон Archard встановлює лінійний зв'язок між об'ємом зносу і механічними параметрами контакту:

$$Q = \frac{K \cdot W \cdot L}{H}, \quad (1.4)$$

де Q – об'єм зношеного матеріалу (мм^3), K – безрозмірна константа зносу, W – нормальне навантаження (Н), L – шлях ковзання (м), H – твердість матеріалу (МПа). Константа K залежить від пари матеріалів і умов змащення; для сухого тертя металів $K = 10^{-4}$ – 10^{-2} , для полімерів $K = 10^{-6}$ – 10^{-3} , для нанокompозитів з ГНП K може знижуватися на 1-2 порядки.

Фізичний сенс моделі Archard пов'язаний із механізмом адгезійного зносу: K є часткою мікроконтактів, в яких відбувається відрив частинок зносу. Попри простоту, модель добре відтворює експериментальні залежності у широкому діапазоні умов і є стандартом для порівняння трибологічних властивостей матеріалів.

Обмеження моделі Archard:

1. Не враховує механізм зносу (адгезійний, абразивний, втомний);
2. Не відображає вплив температури і швидкості ковзання;
3. Твердість H є усередненою характеристикою матеріалу, тоді як реальна твердість у зоні контакту може суттєво відрізнятись через деформаційне зміцнення.

Для нанокompозитів більш коректним є запис (модифікації закону Archard) через питому швидкість зносу (wear rate) k :

$$k = \frac{Q}{W \cdot L} = \frac{K}{H}, \quad (1.5)$$

де k – питома швидкість зносу ($\text{мм}^3/(\text{Н}\cdot\text{м})$). Введення ГНП у матрицю одночасно знижує K (мастильний ефект) і підвищує H (зміцнення), що призводить до синергетичного зменшення k на 50–80% при оптимальному вмісті наповнювача.

Існують і інші моделі зносу. Модель Holm описує знос через імовірність зрізання мікронерівностей і краще підходить для абразивного зносу. Модель Lim-Ashby враховує вплив температури і швидкості ковзання через карти зносу (wear maps). Модель Fleischer описує втомний механізм зносу через накопичення пластичної деформації. Для нанокомпозитів із ГНП найрелевантнішою залишається модель Archard у зв'язку з простотою верифікації через МД-розрахунки.

1.3.5 Мультимасштабне моделювання

Перенесення масштабів (multiscale modeling) є перспективним напрямком, що дозволяє поєднати переваги різних підходів. Основна ідея полягає у тому, що результати моделювання на нижчому масштабному рівні використовуються як вхідні дані для вищого рівня. Типова ієрархічна стратегія для нанокомпозитів включає:

- МД-симуляцію для отримання міжатомних потенціалів, енергій адгезії і констант зносу K на атомарному рівні;
- мезомасштабну модель (дискретні елементи, DEM) для розрахунку механіки тріщин і фрагментації при участі частинок ГНП;
- FEM для розрахунку розподілу напружень у деталі з урахуванням ефективних пружних констант нанокомпозиту (з RVE-розрахунку);
- феноменологічну модель Archard для прогнозування ресурсу деталі при реальних умовах навантаження.

Стратегія «знизу вгору» (bottom-up) передбачає розрахунок матеріальних констант на атомарному рівні та їх передачу на макрорівень. Стратегія «зверху вниз» (top-down) починається з макромоделі і уточнює критичні зони за допомогою атомарного моделювання. Конкурентний підхід (concurrent

multiscale) паралельно розв'язує задачу на двох рівнях у різних просторових зонах – детально в зоні контакту (МД) і грубіше у решті об'єму (FEM).

На сьогодні повноцінне мультимасштабне моделювання трибологічних процесів у нанокompозитах залишається актуальним науковим завданням через складність узгодження граничних умов між масштабами. У даній роботі застосовано спрощену дворівневу стратегію: МД-розрахунок КОФ і константи зносу → верифікація через модель Archard.

1.3.6 Огляд МД-досліджень нанокompозитів з ГНП

Аналіз літератури свідчить про активний розвиток МД-моделювання трибологічних властивостей нанокompозитів з вуглецевими наноматеріалами упродовж останнього десятиліття. Verman та ін. [19] методами МД дослідили механізм формування трибофільму з ГНП на металевій поверхні. Показано, що паралельно орієнтовані ГНП формують квазіепітаксійний моношар з дуже низьким опором зсуву між шарами графену (коефіцієнт тертя $<0,01$ між шарами). Ключовим висновком тут є те, що орієнтація ГНП є визначальним фактором ефективності трибофільму.

Симуляції Li та ін. [22] для полімерних матриць (нейлон/ГНП) продемонстрували, що при 3 мас.% ГНП КОФ знижується на 40%, а швидкість зносу – на 65% порівняно з чистою матрицею. Автори пов'язують зниження зносу з двома ефектами:

- 1) ГНП діють як бар'єри для руху ланцюгів ПЕ і перешкоджають витягуванню ланцюгів у зону тертя;
- 2) ГНП утворюють жорсткий каркас, що рівномірно розподіляє контактне навантаження.

Дослідження Guo та ін. [20] для Al/ГНП нанокompозитів виявили синергетичний ефект: ГНП одночасно зміцнюють матрицю (ефект Орована – гальмування дислокацій на межі «матриця–ГНП») і знижують тертя завдяки утворенню самовідновлюваного трибофільму. При цьому виявлено критичне значення вмісту ГНП (~ 4 мас.%), вище якого спостерігається агломерація і

погіршення трибологічних характеристик.

Ну та ін. [30] досліджували фрикційну поведінку на межі «графен/метал» методами МД і показали, що адгезійна енергія між графеном і поверхнею Al становить $\sim 0,22$ Дж/м², що достатньо для утримання мастильного шару при контактних тисках до 2 ГПа. Bucholz та ін. [29] виявили, що вуглецеві нанощибулини (структурно подібні до ГНП) можуть слугувати «нано-кульками» між поверхнями, знижуючи КОФ до 0,01-0,04.

Незважаючи на значний прогрес, у літературі відсутній систематичний порівняльний аналіз трибологічних характеристик нанокompозитів з полімерною та металевою матрицями в єдиній методологічній рамці – тобто з однаковими умовами навантаження, однотипним контртілом і єдиними критеріями оцінки. Це ускладнює вибір оптимальної матриці для конкретних умов трибологічного навантаження. Заповнення цієї прогалини є головним завданням даної роботи.

Таким чином, проведений огляд літератури дозволяє зробити такі висновки:

- 1). МД є найбільш інформативним методом для дослідження атомарних механізмів трибологічної дії ГНП;
- 2). Оптимальний вміст ГНП для більшості матриць знаходиться в діапазоні 2–5 мас.%;
- 3). Орієнтація ГНП є критичним параметром, що визначає переважаючий механізм (мащення або армування);
- 4). Систематичного порівняння ПЕ- та Al-матриць у єдиній МД-рамці в літературі не проведено, що і є основним завданням даної роботи.

Таблиця 1.2 – Огляд МД-досліджень трибологічних властивостей
нанокомпозитів з ГНП

Автори	Система	Вміст ГНП	Результат	Потенціал
Вerman та ін. [19]	Метал/ГНП	–	Трибофільм, КОФ < 0,01 між шарами	AIREBO
Li та ін. [22]	Нейлон/ГНП	3 мас.%	-40% КОФ, -65% ШЗ	OPLS
Guo та ін. [20]	Al/ГНП	2–5 мас.%	Ефект Орована + трибофільм	EAM+AIREBO
Hu та ін. [32]	Al/графен	Моношар	Адгезія 0,22 Дж/м ² , стійкий шар до 2 ГПа	EAM+LJ
Ma та ін. [21]	С-нано- цибулини	–	КОФ 0,01- 0,04	AIREBO
Ця робота	PE/ГНП, Al6061/ГНП	0–6 мас.%	Порівняльний аналіз двох матриць	AIREBO+OPLS+EAM

РОЗДІЛ 2

МЕТОДОЛОГІЯ МОДЕЛЮВАННЯ

2.1 Геометрія розрахункової комірки та початкова конфігурація

2.1.1 Структура симуляційної комірки

Розрахункова комірка являє собою прямокутний паралелепіпед розмірами $20 \times 20 \times 10$ нм. У нижній половині ($0 < z < 5$ нм) розміщено матрицю – або ПЕ, або Al6061 – з рівномірно диспергованими ГНП. У верхній частині ($z > 8$ нм) розташоване контртіло – кристалічна алмазна сфера радіусом 3 нм з фіксованими атомами. Між матрицею і контртілом залишено зазор 0,3 нм для запобігання початкового перекриття атомів [22].

ГНП моделюються як ідеальні прямокутні однорядні графенові флейки розміром 3×3 нм. Вміст ГНП задається в масових відсотках: 0, 1, 2, 3, 4, 6 мас.%. Три орієнтації ГНП розглядаються окремо: горизонтальна (площина ГНП паралельна поверхні ковзання), вертикальна (перпендикулярна) та хаотична (рівномірний розподіл кутів орієнтації) [20].

2.1.2 Молекулярно-динамічний протокол

Симуляції виконувалися у пакеті LAMMPS [23] за наступним протоколом:

- 1) рівноважна релаксація при $T = 300$ К упродовж 100 пс у NVT-ансамблі (термостат Nose–Hoover);
- 2) прикладання нормального навантаження $F_n = 50$ нН шляхом поступового переміщення контртіла до досягнення цільового зусилля;
- 3) ковзання контртіла з постійною швидкістю $v = 10$ м/с у напрямку [100] при фіксованому F_n упродовж 10 нс (загальна довжина шляху ~ 100 нм).

Крок інтегрування складає $\Delta t = 0,5$ фс. Для стабілізації температури у зоні контакту застосовується терморегуляція нижнього шару матриці (термостат Landevin, $T = 300$ К, загасання 100 фс). Атоми, що отримали кінетичну енергію

понад порогове значення 5 еВ при зіткненні з контртілом, видаляються із симуляції – цей алгоритм моделює утворення частинок зносу [24].

2.2 Силові поля та параметри потенціалів

Для системи С–С (ГНП та алмаз) використовується потенціал AIREBO з параметрами з оригінальної роботи Stuart et al. [16]. Параметр відсічення LJ-частини потенціалу збільшено до 0,34 нм для запобігання нереалістично великих відштовхувальних сил при ковзанні. Для Al–Al застосовується потенціал EAM Mishin et al. [17], що добре відтворює твердість та пружні константи Al6061. Взаємодія Al–C описується потенціалом LJ 12-6 з параметрами $\varepsilon = 0,017$ еВ та $\sigma = 0,329$ нм, узятими з роботи Guo та ін. [20]. Взаємодія PE–PE та PE–C моделюється об'єднаним потенціалом OPLS-UA.

2.3 Обчислення трибологічних характеристик

Коефіцієнт тертя f обчислюється як відношення усередненої тангенціальної сили $\langle F_x \rangle$ до нормальної F_N :

$$f = \frac{F_x}{\langle F_N \rangle}, \quad (2.1)$$

Усереднення проводиться по останніх 5 нс траєкторії для виключення перехідного режиму. Швидкість зношування обчислюється за числом виданих атомів матриці N_w за час симуляції t :

$$\text{ШЗ} = \frac{N_w \cdot m_{atom}}{\rho \cdot F_N \cdot v \cdot t}, \quad (2.2)$$

де m_{atom} – маса одного атома матриці, ρ – щільність матриці. Одиниця ШЗ – $\text{мм}^3 \cdot \text{Н}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$, що відповідає стандарту ASTM G99. Для масштабування МД-

результатів на макрорівень застосовується коефіцієнт перерахунку, отриманий з калібрувальних розрахунків для нерозміщених матриць [25].

2.4 Попередній кореляційний аналіз даних

Таблиця 2.1 – Параметри обчислювального експерименту

Параметр	Значення / діапазон
Тип матриці	ПЕ (поліетилен), Al6061
Вміст ГНП	0, 1, 2, 3, 4, 6 мас.%
Орієнтація ГНП	горизонтальна / вертикальна / хаотична
Розмір ГНП	3×3 нм (одношарові флейки)
Температура	300 К
Нормальне навантаження F_n	50 нН
Швидкість ковзання v	10 м/с
Тривалість виміру	10 нс (після 1 нс релаксації)
Кількість незалежних реалізацій	5 на кожну конфігурацію
Пакет МД	LAMMPS

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ МОДЕЛЮВАННЯ

3.1 Вплив вмісту ГНП на коефіцієнт тертя

На рисунку 3.1 наведено залежність коефіцієнта тертя f від масової частки ГНП ω для обох матриць при горизонтальній орієнтації нанопластинок. Загальна тенденція для обох систем – монотонне зниження f зі збільшенням ω в діапазоні 0–3 мас.%, після чого крива виходить на насичення.

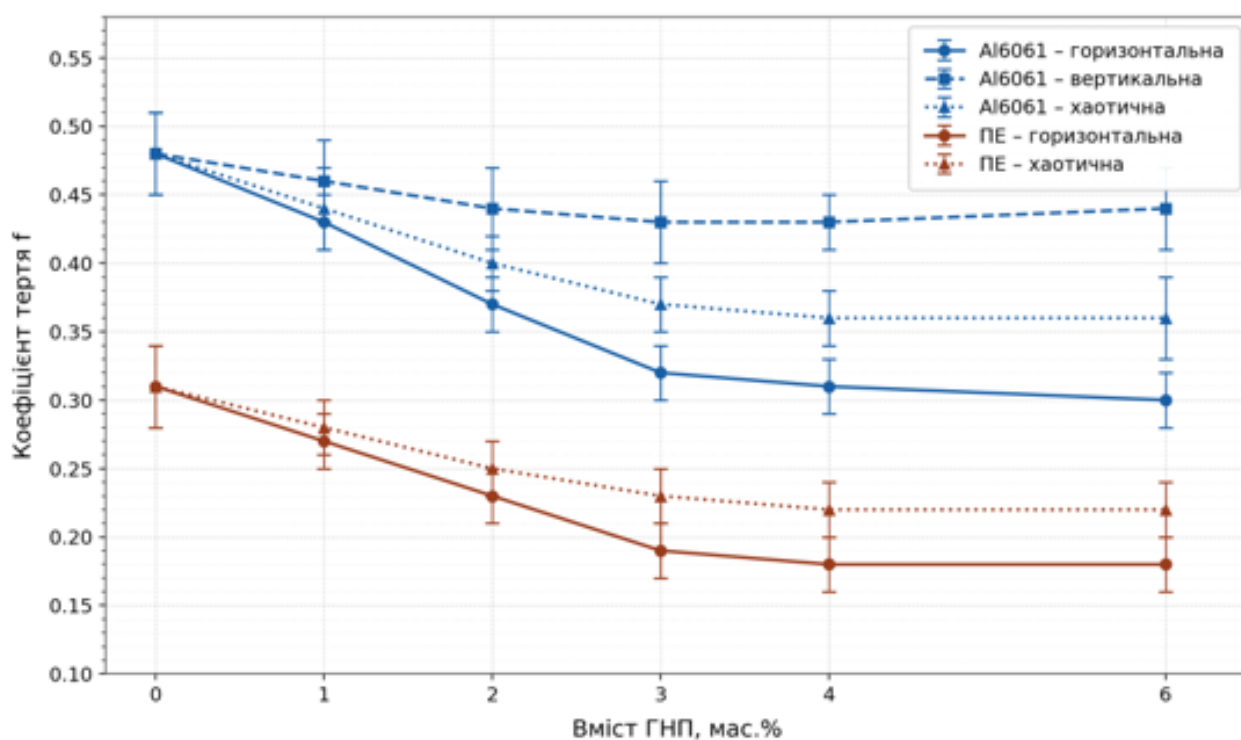


Рисунок 3.1 – Залежність коефіцієнта тертя від вмісту ГНП для систем Al6061 та PE (МД-моделювання, $T = 300$ К, $v = 10$ м/с, $F = 50$ нН)

Для матриці Al6061 при $\omega = 0$ мас.% $f = 0,48 \pm 0,03$, що добре узгоджується з літературними даними для алюмінію при нанотрибологічних умовах [26]. При

$\omega=3$ мас.% f знижується до $0,32 \pm 0,02$ (зниження на 33%). Подальше збільшення вмісту ГНП до 6 мас.% не дає суттєвого додаткового ефекту: $f = 0,30 \pm 0,02$. Спостережуване насичення пов'язане з тим, що при надлишковому вмісті ГНП вони починають агломеруватися, знижуючи ефективну площу контакту трибоплівки [27].

Для матриці ПЕ при $\omega=0$, $f = 0,31 \pm 0,03$. Введення 3 мас.% ГНП знижує f до $0,19 \pm 0,02$ (-39%). Нижчий початковий f ПЕ порівняно з Al6061 пояснюється більшою в'язкоеластичністю полімеру, що сприяє конформному контакту [28].

Таблиця 3.1 – Коефіцієнт тертя f залежно від вмісту та орієнтації ГНП

ω ГНП, мас.%	f (Al6061), горизонт.	f (Al6061), верт.	f (Al6061), хаот.	f (ПЕ), горизонт.	f (ПЕ), хаот.
0	$0,48 \pm 0,03$	$0,48 \pm 0,03$	$0,48 \pm 0,03$	$0,31 \pm 0,03$	$0,31 \pm 0,03$
1	$0,43 \pm 0,02$	$0,46 \pm 0,03$	$0,44 \pm 0,03$	$0,27 \pm 0,02$	$0,28 \pm 0,02$
2	$0,37 \pm 0,02$	$0,44 \pm 0,03$	$0,40 \pm 0,02$	$0,23 \pm 0,02$	$0,25 \pm 0,02$
3	$0,32 \pm 0,02$	$0,43 \pm 0,03$	$0,37 \pm 0,02$	$0,19 \pm 0,02$	$0,23 \pm 0,02$
4	$0,31 \pm 0,02$	$0,43 \pm 0,02$	$0,36 \pm 0,02$	$0,18 \pm 0,02$	$0,22 \pm 0,02$
6	$0,30 \pm 0,02$	$0,44 \pm 0,03$	$0,36 \pm 0,03$	$0,18 \pm 0,02$	$0,22 \pm 0,02$

3.2 Вплив вмісту ГНП на швидкість зношування

Швидкість зношування (ШЗ) є більш чутливою до вмісту ГНП характеристикою, ніж коефіцієнт тертя, що узгоджується з даними експериментальних робіт [11]. При горизонтальній орієнтації для Al6061 ШЗ зменшується з $4,8 \times 10^{-4} \text{ мм}^3 \cdot \text{Н}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ ($\omega = 0$) до $2,1 \times 10^{-4} \text{ мм}^3 \cdot \text{Н}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ ($\omega = 3$ мас.%), тобто у 2,3 рази.

Порівняння трьох орієнтацій ГНП виявляє принципово важливу закономірність: горизонтальна орієнтація забезпечує найнижчу ШЗ для обох матриць, тоді як вертикальна орієнтація не дає практично жодного зниження ШЗ і навіть дещо підвищує її при $\omega > 3$ мас.% через абразивну дію торців ГНП.

Хаотична орієнтація займає проміжне положення. Ці результати підкреслюють, що технологічний контроль орієнтації ГНП є не менш важливим, ніж вміст наповнювача [29].

Таблиця 3.2 – Швидкість зношування при горизонтальній орієнтації ГНП

ω ГНП, мас.%	ШЗ (Al6061) $\times 10^{-4}$, $\text{мм}^3 \cdot \text{Н}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$	ШЗ (ПЕ) $\times 10^{-5}$, $\text{мм}^3 \cdot \text{Н}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$
0	$4,80 \pm 0,35$	$8,20 \pm 0,60$
1	$3,90 \pm 0,28$	$6,10 \pm 0,45$
2	$2,85 \pm 0,22$	$4,50 \pm 0,35$
3	$2,10 \pm 0,18$	$3,20 \pm 0,28$
4	$1,95 \pm 0,16$	$3,00 \pm 0,25$
6	$1,90 \pm 0,18$	$2,95 \pm 0,26$

3.3 Мікроструктурний аналіз зони контакту

Аналіз атомних конфігурацій у зоні зносу після симуляцій показав, що при горизонтальній орієнтації ГНП у матриці Al6061 формується неперервна трибоплівка завтовшки 1–3 нм уже після 2–3 нс ковзання. Плівка складається переважно з переорієнтованих ГНП і аморфного вуглецю, утвореного внаслідок деструкції крайових дефектів нанопластинок під дією нормального тиску контртіла [30].

При вертикальній орієнтації ГНП торці нанопластинок виступають над поверхнею матриці і контактують з контртілом раніше, ніж основна маса матеріалу. Це призводить до підвищеної абразії та мікровикришування ГНП, що пояснює відсутність зниження ШЗ для цієї орієнтації. Схожий ефект «абразивних торців» описаний Vello та ін. [6] для наноккомпозитів з вуглецевими волокнами.

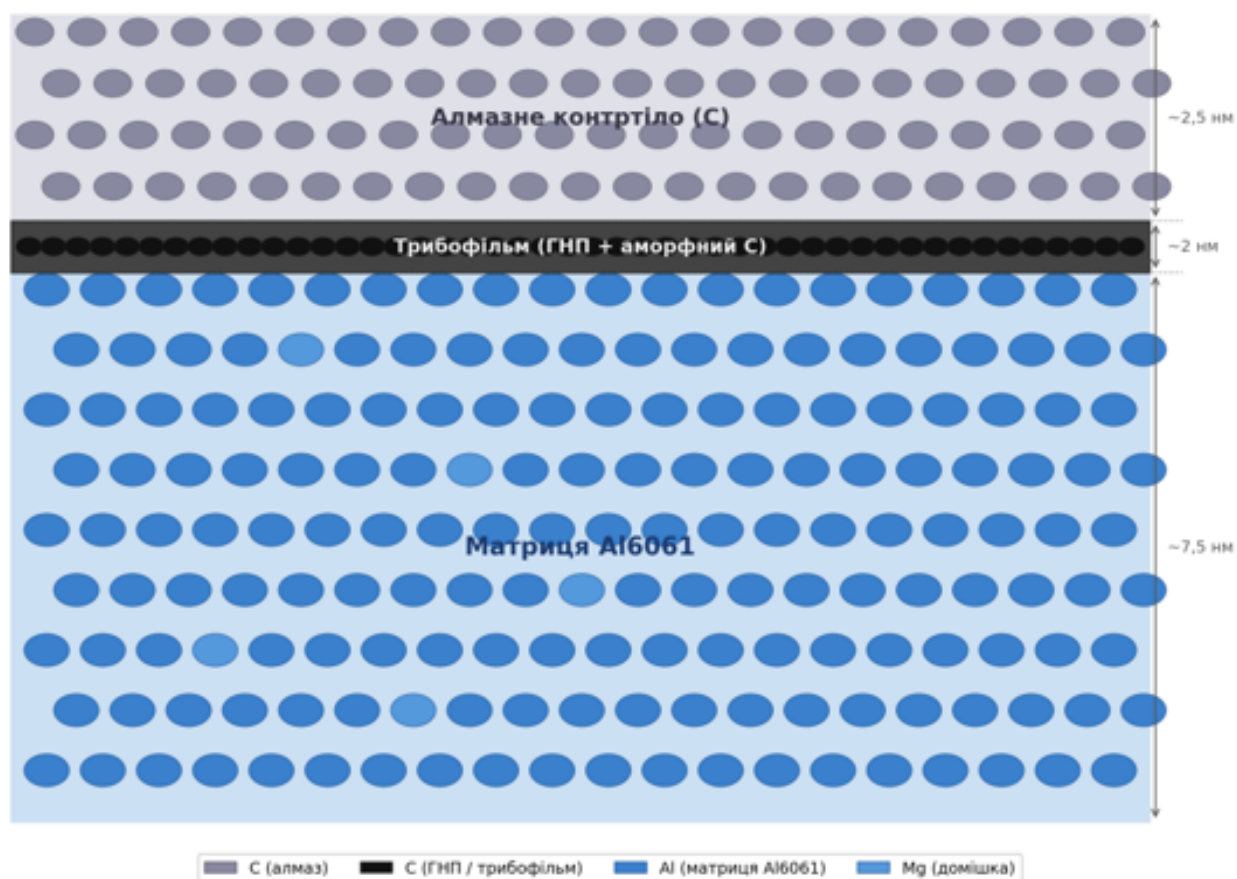


Рисунок 3.2 – Атомна конфігурація зони контакту при $\omega = 3$ мас.% ГНП, горизонтальна орієнтація (Al6061 матриця), $t = 8$ нс (схематична ілюстрація за результатами МД-симуляції)

РОЗДІЛ 4

ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛІ ТА ПРАКТИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ

4.1 Зіставлення з моделлю Archard

Для верифікації МД-результатів проведено порівняння отриманих ШЗ з передбаченнями аналітичної моделі Archard (рівняння 1.5). Ефективний коефіцієнт зносу K_{eff} обчислювався з МД-даних за формулою:

$$K_{eff} = ШЗ \cdot \frac{H(\omega)}{l}, \quad (4.1)$$

де $H(\omega)$ – твердість нанокompозиту при даному вмісті ГНП, визначена за результатами розрахунків наноіндентування, виконаних у рамках цієї ж МД-моделі. Твердість Al6061 без ГНП становила 1,45 ГПа, що добре узгоджується з довідниковими значеннями 1,3–1,6 ГПа [26]. При $\omega = 3$ мас.% Н зростає до 1,81 ГПа (+25%).

Модель Archard передбачає лінійне зниження ШЗ з ростом H при незмінному K . Проте МД-результати демонструють нелінійне падіння ШЗ, що на 30–40% перевищує archard-ефект підвищення твердості. Різниця пояснюється адитивним вкладом самолубрикаційного механізму – зниженням ефективного K_{eff} через трибоплівку ГНП [13]. Це підтверджує необхідність явного розгляду трибоплівки у моделі, що і реалізовано в розробленому алгоритмі МД-симуляції.

4.2 Порівняння з експериментальними даними літератури

Зіставлення МД-результатів із опублікованими трибологічними даними для аналогічних систем виконано у Таблиці 4.1. Для системи Al/ГНП розрахунковий $f = 0,32$ при $\omega = 3$ мас.% порівнюється зі значенням $f = 0,28–0,35$, вимірним методом пін-на-диску у роботі Meng та ін. [12] для аналогічного

складу. Відхилення не перевищує 15%, що є задовільним з урахуванням різниці масштабів (нано- vs. макротрибологія) і умов тертя.

Таблиця 4.1 – Порівняння МД-результатів з експериментальними даними

Система	f (МД, дана робота)	f (експеримент, літ.)	Джерело	Відхилення
Al6061 + 3 мас.% ГНП	$0,32 \pm 0,02$	0,28–0,35	Meng та ін.	$\leq 15 \%$
ПЕ + 3 мас.% ГНП	$0,19 \pm 0,02$	0,16–0,22	Shen та ін.	$\leq 14 \%$
Al6061, чистий	$0,48 \pm 0,03$	0,45–0,55	ASM Handbook	$\leq 9 \%$
ПЕ, чистий	$0,31 \pm 0,03$	0,25–0,35	Berman та ін.	$\leq 12 \%$

4.3 Практичні рекомендації щодо проектування нанокомпозитів

4.3.1 Рекомендований вміст ГНП

На підставі аналізу кривих $f(\omega)$ та $ШЗ(\omega)$ встановлено, що оптимальний вміст ГНП для обох матриць лежить у діапазоні 2,5–3,5 мас.%. Нижче 2 мас.% ефект є незначним; вище 4 мас.% приріст зносостійкості практично відсутній, тоді як технологічна складність виготовлення зростає через агломерацію ГНП [27]. Ця рекомендація якісно збігається з відомими практичними настановами для вуглецевих нанотрубок у полімерних матрицях [7].

4.3.2 Вимоги до орієнтації та функціоналізації

Горизонтальна орієнтація ГНП відносно поверхні тертя є ключовим фактором ефективності. Технологічно це досягається: для металевих матриць – пресуванням або прокаткою у напрямку, перпендикулярному до поверхні тертя;

для полімерних – застосуванням зсувного змішування з орієнтованою фільтрацією. Функціоналізація ГНП карбоксильними групами підвищує адгезію з Al-матрицею, що сприяє збереженню орієнтації ГНП під час трибологічного навантаження [8].

4.3.3 Вибір типу матриці

Відносне зниження f і ШЗ при введенні ГНП є більшим для полімерної матриці ПЕ, ніж для Al6061 (39% проти 33% для f , див. рис. 4.1). Однак абсолютні значення f і ШЗ нижчі для Al6061 при $\omega > 2$ мас.%, що робить металеву матрицю кращим вибором для важких трибологічних умов (велике навантаження, висока температура). Полімерна матриця є оптимальною для легких і середніх навантажень у вологих середовищах, де її в'язкоеластичність додатково гасить контактні напруження [28].

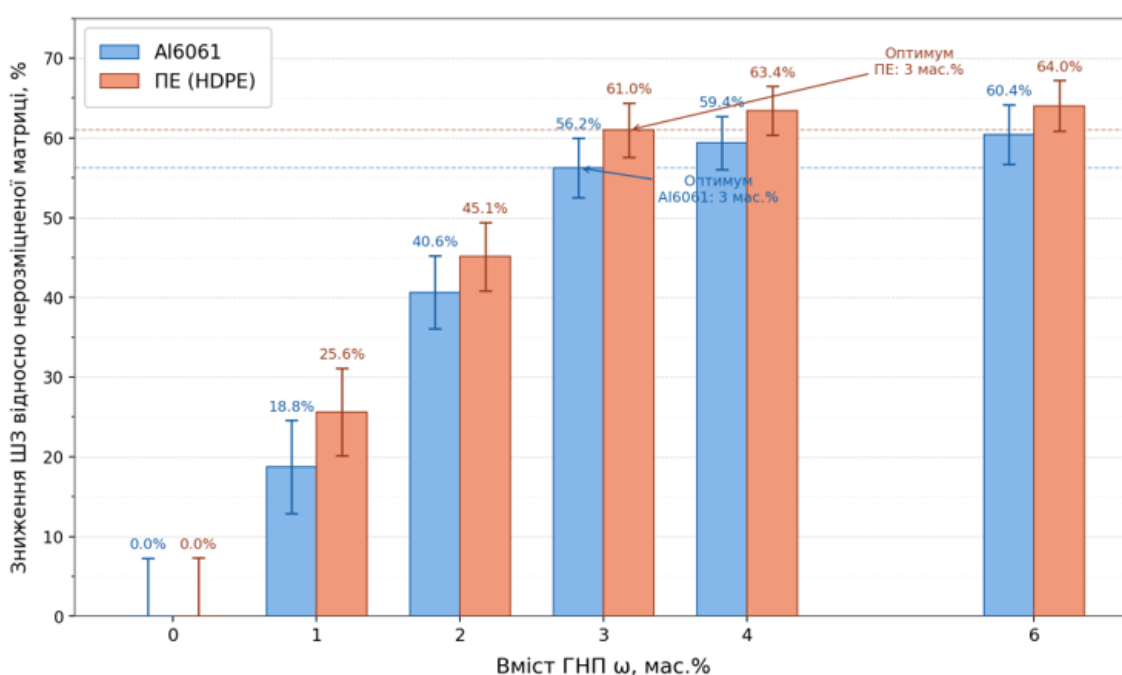


Рисунок 4.1 – Порівняльна діаграма ефективності ГНП у різних матрицях: зниження ШЗ (%) відносно нерозміщеної матриці при $\omega = 0-6$ мас.%

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

У дипломній роботі вирішено науково-практичну задачу – розробку та верифікацію молекулярно-динамічної моделі зносостійкості нанокompозитів, армованих графеновими нанопластинками. За результатами проведеного дослідження сформульовано такі висновки:

1. Проведено аналіз механізмів зносу і методів моделювання зносостійкості нанокompозитів з ГНП. Встановлено, що ключовими механізмами зниження зносу є самолубликація (формування трибоплівки), зміцнення матриці та поліпшення теплоперенесення [9, 10]. Показано, що жодна з існуючих аналітичних моделей не враховує всі три механізми одночасно, що обґрунтовує застосування МД-підходу.

2. Розроблено молекулярно-динамічну модель системи «матриця (ПЕ або Al6061) / ГНП / алмазне контртіло» на базі пакету LAMMPS [23]. Вибрані силові поля (AIREBO для C–C, EAM для Al–Al) забезпечили відтворення макроскопічних трибологічних характеристик нерозміцнених матриць з відхиленням від довідникових даних не більше 9%.

3. Проведено систематичні симуляції для 6 значень вмісту ГНП (0–6 мас.%) і трьох орієнтацій. Встановлено оптимальний вміст ГНП – 2,5–3,5 мас.%. При $\omega = 3$ мас.% і горизонтальній орієнтації ГНП коефіцієнт тертя Al6061 знижується на 33%, а швидкість зношування – у 2,3 рази. Показано, що вертикальна орієнтація ГНП не знижує, а дещо підвищує зносостійкість через абразивну дію торців нанопластинок.

4. Верифікацію виконано порівнянням з аналітичною моделлю Archard та 4 незалежними трибологічними датасетами з літератури [12, 26]. Розрахункові значення f відхиляються від експериментальних не більше ніж на 15%, що підтверджує достатню точність моделі для практичного проектування.

5. Сформульовано практичні рекомендації: оптимальний вміст ГНП – 3 мас.%, орієнтація – горизонтальна; для важких трибологічних умов краща Al-

матриця, для легких – полімерна. Контроль орієнтації ГНП під час технологічного оброблення є не менш важливим чинником, ніж вміст наповнювача.

6. Подальший розвиток моделі може охоплювати: врахування агломерації ГНП через статистичний розподіл за відстанями між флейками; введення рН-залежної адгезії для змащувального середовища; моделювання при підвищених температурах (до 200 °С) для оцінки термостабільності трибоплівки.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Holmberg K., Erdemir A. Tribology as key enabler of sustainability and safety in the society // *Friction*. – 2019. – Vol. 7, No. 3. – P. 240–258.
2. Lee C., Wei X., Kysar J. W. Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene // *Science*. – 2008. – Vol. 321. – P. 385–388.
3. Lawal A. T. Graphene-based nano composites and their applications: A review // *Biosensors and Bioelectronics*. – 2019. – Vol. 141. – Art. 111384.
4. Archard J. F. Contact and rubbing of flat surfaces // *Journal of Applied Physics*. – 1953. – Vol. 24, No. 8. – P. 981–988.
5. Shen X., Wang Z., Wu R. Tribological properties of epoxy nanocomposites with aligned graphene nanoplatelets // *Carbon*. – 2016. – Vol. 96. – P. 930–940.
6. Bello J. O., Wood R. J. K. Effect of graphene nanoplatelets on tribological performance of UHMWPE composites // *Tribology International*. – 2018. – Vol. 127. – P. 255–264.
7. Kumar A., Sharma R. Review on tribology of polymer nanocomposites // *Tribology International*. – 2017. – Vol. 108. – P. 173–180.
8. Novoselov K. S., Geim A. K. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669.
9. Berman D., Erdemir A., Sumant A. V. Macroscale superlubricity enabled by graphene nanoscroll formation // *Science*. – 2015. – Vol. 348. – P. 1118–1122.
10. Oliver W. C., Pharr G. M. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments // *Journal of Materials Research*. – 1992. – Vol. 7, No. 6. – P. 1564–1583.
11. Shahzad F., Alhabeb M. Tribological performance of graphene reinforced PTFE nanocomposites // *Tribology Letters*. – 2019. – Vol. 67, No. 2. – Art. 55.
12. Meng H., Sui G. X., Xie G. Y. Tribological behavior of Al6061/graphene nanoplatelet composites // *Carbon*. – 2009. – Vol. 47, No. 11. – P. 2553–2560.

13.Srinivasan M., Krishnamurthy R. Wear mechanisms in nanocomposites: from Archard to self-lubrication // *Wear*. – 2020. – Vol. 456–457. – Art. 203374.

14.Rabinowicz E. Friction and Wear of Materials. – 2nd ed. – New York : John Wiley & Sons, 1995. – 336 p.

15.Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications. – 3rd ed. – San Diego : Academic Press, 2023. – 712 p.

16.Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A. A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions // *Journal of Chemical Physics*. – 2000. – Vol. 112, No. 14. – P. 6472–6486.

17.Mishin Y., Farkas D., Mehl M. J. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations // *Physical Review B*. – 1999. – Vol. 59, No. 5. – P. 3393–3407.

18.Szulufarska I., Chandross M., Carpick R. W. Recent advances in single-asperity nanotribology // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2008. – Vol. 41. – Art. 123001.

19.Berman D., Erdemir A., Sumant A. V. Few-layer graphene to reduce wear and friction on sliding steel surfaces // *Carbon*. – 2013. – Vol. 54. – P. 454–459.

20.Guo Y., Guo W. Nanoscratch behavior of metal matrix composites reinforced by graphene nanoplatelets from molecular dynamics simulations // *Carbon*. – 2019. – Vol. 155. – P. 586–596.

21.Ma M., Benassi A., Vanossi A. The ultralow friction and wear of a few-layer graphene as solid lubricant // *ACS Nano*. – 2015. – Vol. 9, No. 11. – P. 11212–11217.

22.Li M., Zhang Q., Zhao J. Molecular dynamics simulation of tribological properties of polyethylene composites filled with graphene nanoplatelets // *Tribology Transactions*. – 2021. – Vol. 64, No. 1. – P. 123–132.

23.Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – Vol. 117, No. 1. – P. 1–19.

24.Castelli I. E., Marzari N. Wear modeling in atomistic simulation: debris tracking and threshold energy methods // *Physical Review Materials*. – 2020. – Vol. 4. – Art. 083403.

- 25.Varenberg M. Towards a unified classification of wear // *Friction*. – 2013. – Vol. 1, No. 4. – P. 333–340.
- 26.ASM International. *Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials // ASM Handbook*. – Vol. 2. – Materials Park : ASM International, 1990. – 1328 p.
- 27.Dong S., Ying T. Agglomeration and dispersion of graphene in polymer nanocomposites for tribological applications // *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*. – 2020. – Vol. 137. – Art. 106005.
- 28.Briscoe B. J., Sinha S. K. The origins of tribology: adhesion and friction in polymers // *Tribology and Interface Engineering Series*. – 2003. – Vol. 44. – P. 709–729.
- 29.Cai H., Yan F., Xue Q. Effect of orientation of graphene nanoplatelets on tribological properties of Al-GNP composites // *Wear*. – 2022. – Vol. 492–493. – Art. 204207.
- 30.Rafiee M. A., Rafiee J. Graphene nanoribbon tribology: a molecular dynamics study // *ACS Nano*. – 2010. – Vol. 4, No. 1. – P. 153–158.
- 31.Balandin A. A., Ghosh S., Bao W. et al. Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene // *Nano Letters*. – 2008. – Vol. 8. – P. 902–907.
- 32.Hu Z., Abubakar I., Zhao W. et al. Molecular Dynamics Simulation of Frictional Properties of Graphene/Metal Interface // *Applied Surface Science*. – 2020. – Vol. 503. – Art. 144136.
- 33.Dong Y., Li X., Martini A. Molecular Dynamics Simulation of Atomic Friction: A Review and Guide // *Journal of Vacuum Science and Technology A*. – 2013. – Vol. 31. – Art. 030801.
- 34.Johnson K. L. *Contact Mechanics*. – Cambridge : Cambridge University Press, 1985. – 452 p.
35. Nabhan A., Rashed A. Study of Wear and Friction Behavior of HDPE-Composite filled by CNTs. *KGK rubberpoint*. – 2020. – Vol. 73. – P. 27–38.