

**Атомістичне моделювання стиснення та зсуву  
ультратонкої плівки сірковуглецю між поверхнями алмазу**

**Хоменко О.В., Бойко Д.В., Логвиненко Д.Т.**

*Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2,  
40007, м. Суми, Україна  
e-mail: o.khomenko@mss.sumdu.edu.ua*

Розробка зносостійких поверхонь з низьким тертям і тонких мастильних плівок стала важливим фактором у мініатюризації рухомих частин в багатьох технічних приладах [1]. Звичайні трибологічні методи, що використовуються для дослідження макроскопічних об'єктів, в даному випадку можуть виявитися неефективними. Моделювання методом молекулярної динаміки є компромісом між аналітичними моделями і експериментальними умовами. Розглядалася ультратонка плівка сірковуглецю, обмежена двома твердими алмазними стінками як атомарно-гладенькими, так і з періодичним атомарним рельєфом. Періодичні граничні умови в площині пластин застосовано до рідини і поверхонь. Для спрощення завдання пластини вважаються абсолютно жорсткими, і модель не включає пружності поверхонь. При моделюванні отримані: сила підкладки, усереднена сила тертя, кінетична та повна енергії, коефіцієнт дифузії. Зроблено висновок, що лінійне зростання сили тертя з навантаженням визначається ростом адгезійних зв'язків, що пояснює швидке досягнення насичення сили тертя зі збільшенням навантаження для всіх розглянутих моделей. Рельєф поверхонь якісно не впливає на часові залежності сили підкладки та тертя, і в цілому останні відображають твердоподібну структуру плівки. Зміна середнього за часом значення кінетичної сили тертя з навантаженням для обох типів поверхонь задовольняє моделі «бруківки» у наближенні переважання адгезійних взаємодій. Отримані в моделюваннях залежності проявляють схожість з експериментальними залежностями для простих сферичних молекул.

1. Khomenko A.V. Molecular Dynamics of a Thin Liquid Argon Layer Squeezed between Diamond Surfaces with a Periodic Relief / A.V. Khomenko, D.V. Boyko, M.V. Zakharov // Journal of Friction and Wear. – 2018. - V. 39, No. 2. - P. 152–157.