

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЭПОКСИДНОГО НАНОКОМПОЗИТА: МЕЗОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ



Малышев Максим Дмитриевич¹, Комаров Павел Вячеславович^{1,2}

¹Тверской государственный университет, Тверь, Россия

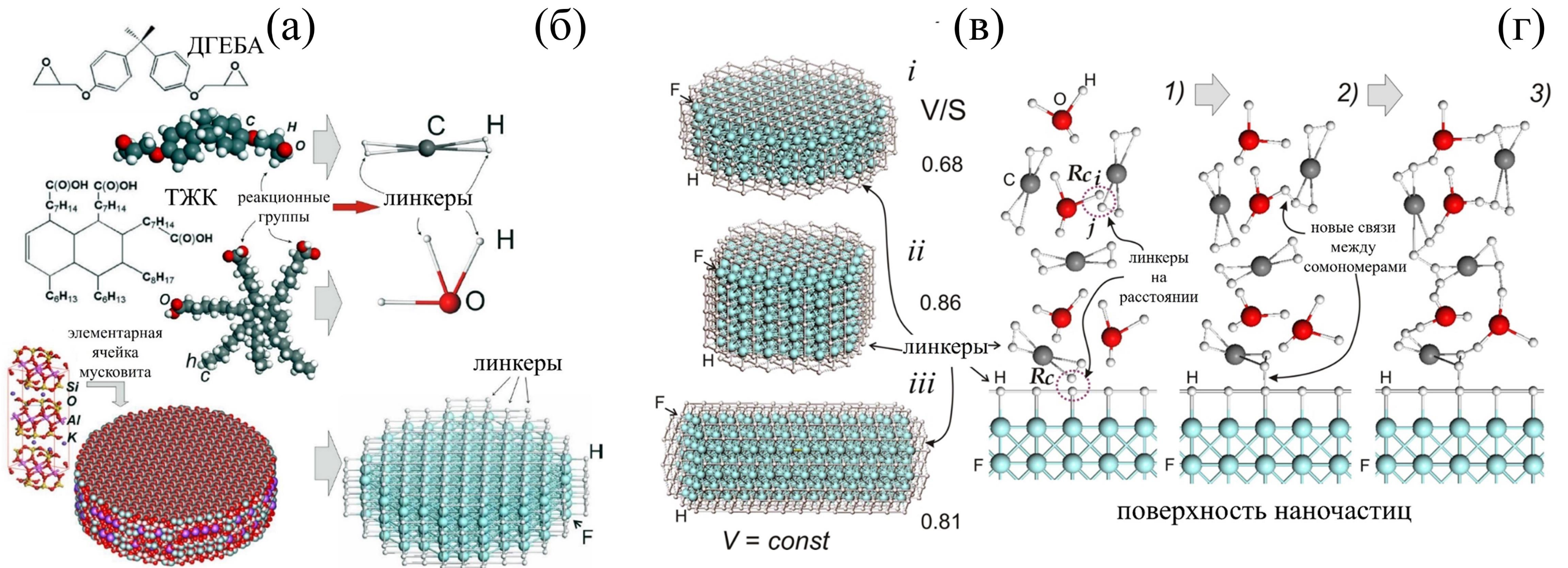
²Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН

bggf@bk.ru



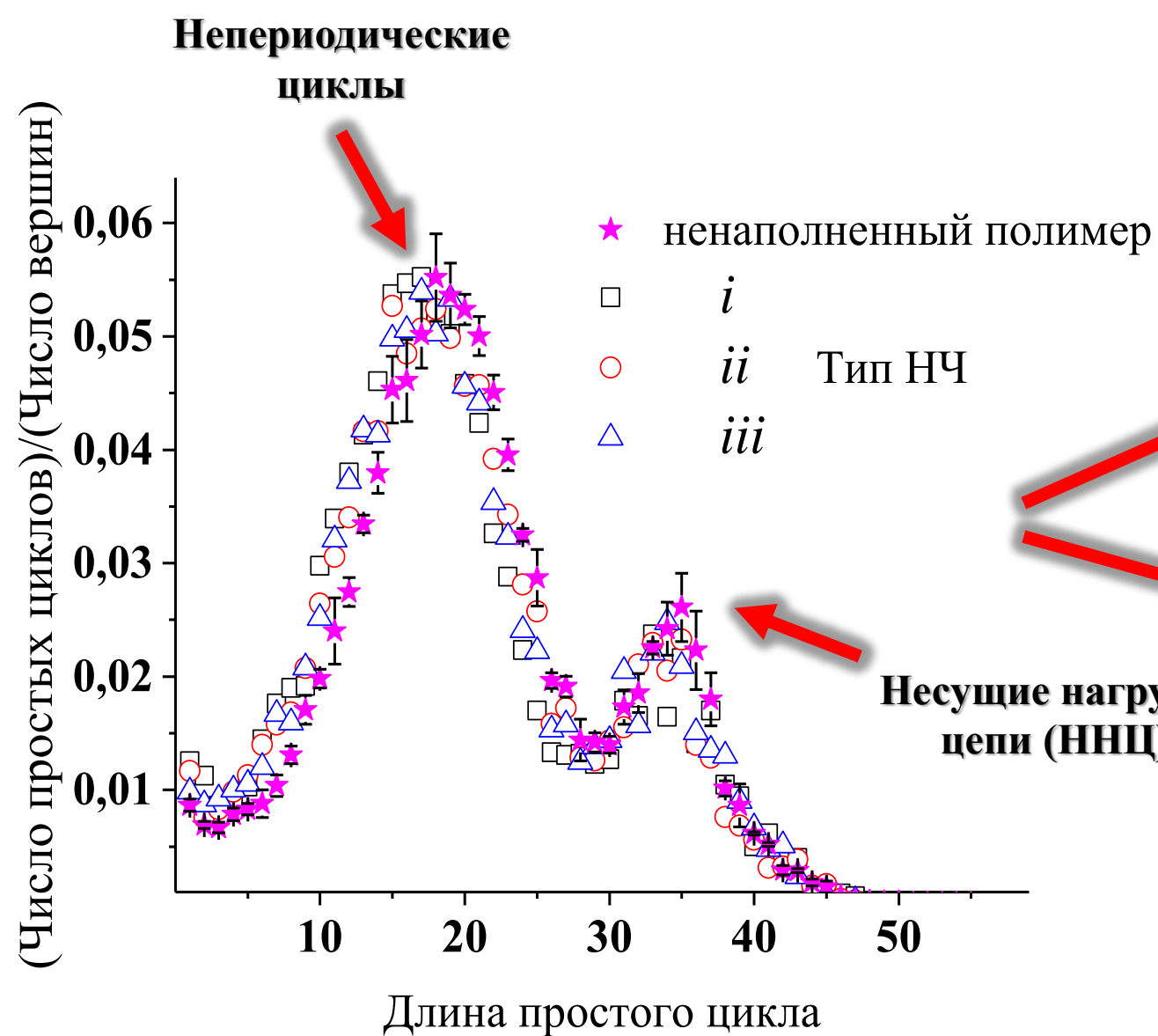
Создание перерабатываемых полимерных материалов (ППМ) является актуальной задачей из-за остро стоящей проблемы утилизации полимерных отходов. По своим эксплуатационным характеристикам ППМ почти не уступают пластикам на основе нефтепродуктов. Однако, их отдельные свойства (недостаточная механическая прочность, низкая температура тепловой деструкции и др.) ограничивают возможность использования ППМ. Для *улучшения свойств полимеров* широко используется подход, основанный на *введении в них* различных неорганических наполнителей в виде *наночастиц (НЧ)*. Хотя регулирующая роль наночастиц хорошо известна, *построение компьютерных моделей, способных прогнозировать свойства* наноматериалов с учетом геометрических размеров НЧ, их формы и степени сшитости (*DCN*) с полимерной матрицей, *представляет собой трудную задачу*.

МЕЗОМАСШТАБНАЯ МОДЕЛЬ ЭПОКСИДНОГО НАНОКОМПОЗИТА



(а) Химические структуры и полноатомное модельное представление мономера эпоксидной смолы: диглицидиловый эфир бисфенола А (ДГЕБА), отвердителя: трикарбоновой жирной кислоты (ТЖК) и мусковита (Н, С, О, Si, К и Al названия химических элементов). (б) Соответствующие крупнозернистые модельные представления. (в) Сконструированные наночастицы трех типов с разным соотношением сторон. (г) Реакция отверждения: (1) два линкера на расстоянии $< R_c$ (радиуса обрезки), (2) образование новых связей между ДГЕБА-ТЖК и ДГЕБА-НЧ, (3) фрагмент полимерной сетки, образующийся в ходе химических реакций. Буквы С, О и F обозначают соответствующие подсистемам ДДЧ-биды и линкеры Н. Линкеры сопоставляются атомам, которые в исходных химических структурах принимают участие в химических реакциях.

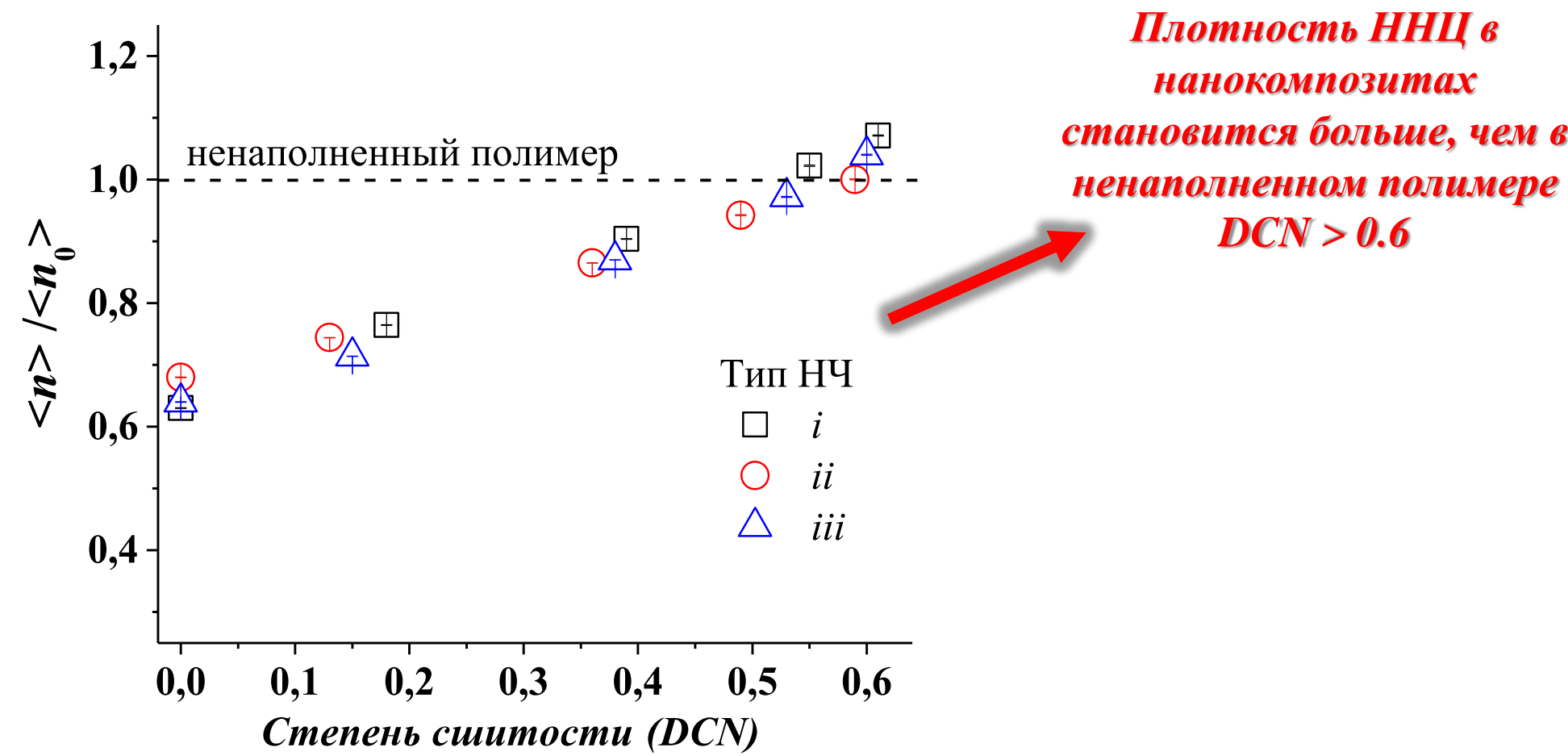
ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ



Типичные для эпоксидных сеток бимодальные профили

Наполненная сеть менее жесткая по сравнению с ненаполненной

Несущие нагрузку цепи (ННЦ)



Плотность ННЦ в нанокompозитах становится больше, чем в ненаполненном полимере $DCN > 0.6$

Рис. 1. Нормированные распределения длин простых циклов для ненаполненной полимерной сетки и сеток, содержащих наночастицы *i*, *ii* и *iii* типов (нулевая степень сшитости).

Рис. 2. Нормированная усредненная плотность несущих нагрузку цепей (ННЦ) $\langle n \rangle / \langle n_0 \rangle$. Здесь $\langle n \rangle$ - среднее значение n_α ($\alpha = x, y, z$) для нанокompозитов с наночастицами *i*, *ii* и *iii* типов. Контрольное значение $\langle n \rangle = 1.67 \pm 0.03$ - это усредненное значение n_α для ненаполненной полимерной сетки. Пунктирная линия соответствует ненаполненному полимеру.

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

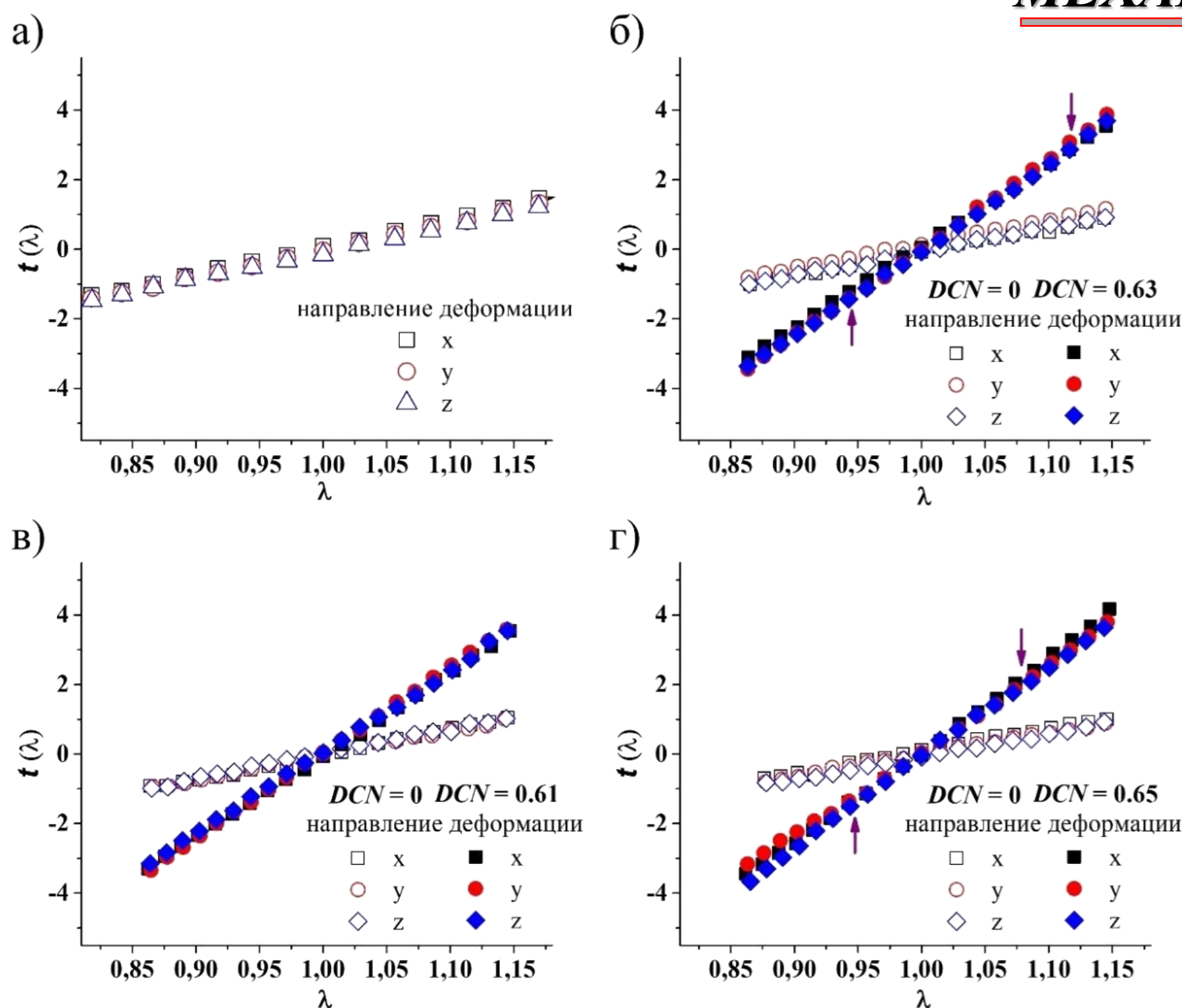
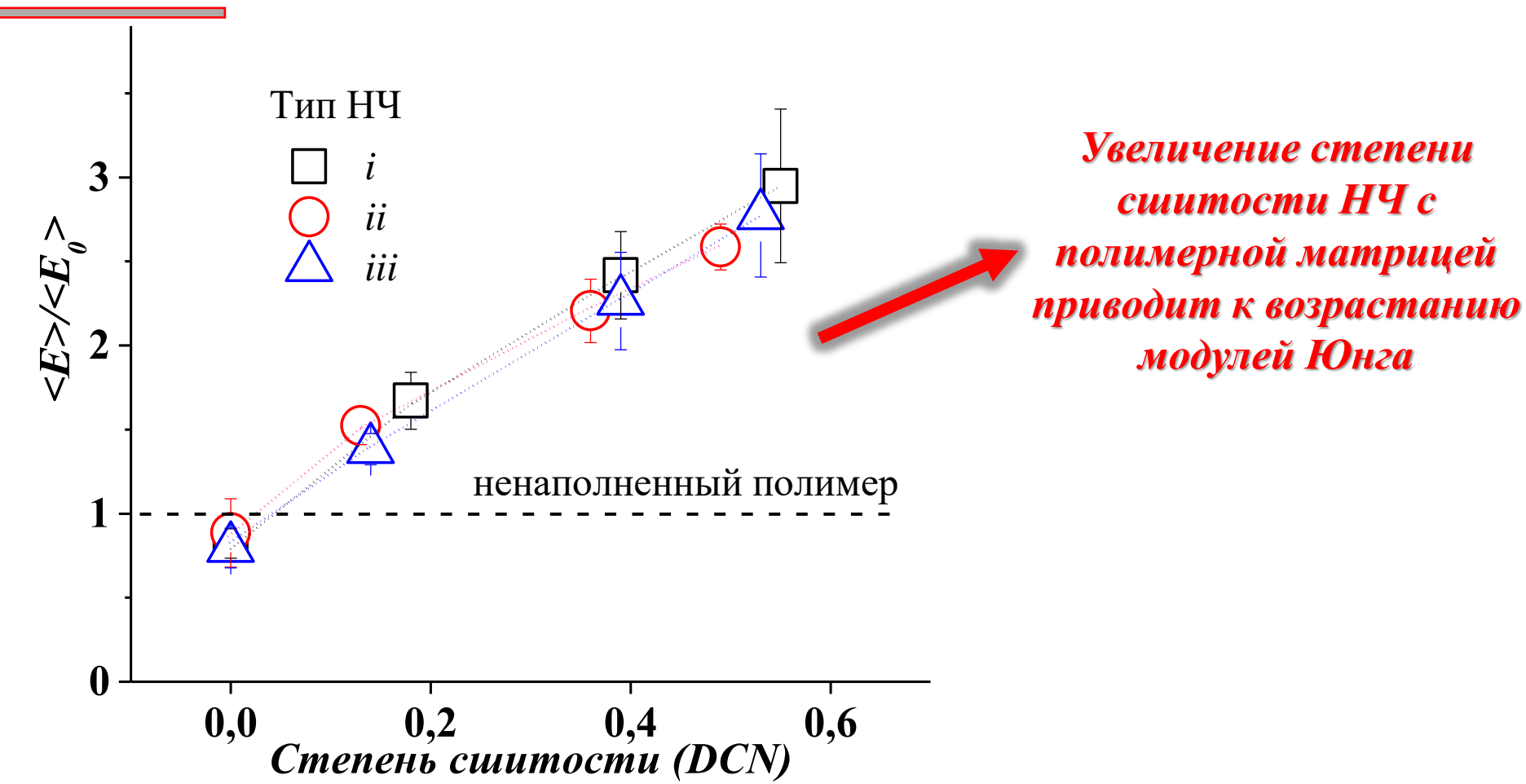


Рис. 3. Зависимости “деформация-напряжение” для режимов растяжения ($\lambda > 1$) и сжатия ($\lambda < 1$) в направлениях осей *x*, *y* и *z* для ненаполненной полимерной сетки (а); нанокompозит с наночастицами типов *i* (б), *ii* (в) и *iii* (г). Стрелки на (б) и (г) указывают начало нелинейного поведения $t_\alpha(\lambda_\alpha)$.



Увеличение степени сшитости НЧ с полимерной матрицей приводит к возрастанию модулей Юнга

Рис. 4. Нормированный усредненный модуль Юнга $\langle E \rangle / \langle E_0 \rangle$ ($\alpha = x, y, z$) для нанокompозитов с наночастицами *i*, *ii* и *iii* типов. Здесь $\langle E \rangle$ - среднее значение E_α при разной степени сшитости НЧ с матрицами. Среднее значение модулей упругости E_α ненаполненного полимера используется в качестве эталонного значения $\langle E_0 \rangle = 8.04 \pm 0.27$ единиц ДДЧ. Пунктирная линия соответствует ненаполненному полимеру.

ВЫВОДЫ:

- 1) Увеличение степени сшитости НЧ с полимером приводит к постепенному возрастанию плотности числа ННЦ. При этом, когда значение $DCN > 0.6$ плотность числа ННЦ становится больше, чем в ненаполненном полимере.
- 2) Модуль Юнга для системы с немодифицированными наночастицами меньше, чем для ненаполненной матрицы. В то же время увеличение DCN приводит к значительному возрастанию модулей Юнга, что коррелирует с увеличением плотности ННЦ.