

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМОПЛАСТИЧНЫХ ПОЛИМЕРОВ

Люлин С.В.

*Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук, г. Санкт-Петербург, В. О. Большой пр. 31, Россия
E-mail: s.v.lyulin@gmail.com*

В настоящее время наиболее перспективными полимерными связующими для производства полимерных композитов с контролируемыми свойствами являются термопласты. Среди них полиимиды, в том числе разрабатываемые в ИВС РАН, отличаются наибольшей термостойкостью и допускают вторичную переработку и производство композитов по расплавной технологии. Другой популярный термопласт – полимолочная кислота – наиболее перспективное связующее при разработке новых медицинских материалов и 3D печати. Большинство макроскопических характеристик полимерных композитов и нанокомпозитов определяются не только свойствами самой полимерной матрицы, но и свойствами и количеством введенного в матрицу наполнителя, а также характером взаимодействия между матрицей и наполнителем. Поэтому атомистическое компьютерное моделирование, детально учитывающее особенности химической структуры компонентов композиционных материалов, является одним из наиболее эффективных методов предсказания свойств новых полимерных композитов.

В работе представлены результаты моделирования полимерных нанокомпозитов на основе термопластичных полимеров методом молекулярной динамики на микросекундном масштабе времен. Рассмотрены основные проблемы, возникающие при моделировании полимерных композитов с учетом детальной химической структуры компонентов. Разработанная схема моделирования позволила изучить структуру межфазной области и особенности структуры молекул, привитых к поверхности нанонаполнителя. Длительное моделирование позволяет исследовать начальные процессы упорядочения кристаллизующихся термопластов, инициируемые введением углеродных нанонаполнителей. Установлена взаимосвязь между механическими и теплофизическими свойствами исследуемых полимеров и их локальной ориентационной подвижностью. Введение углеродных нанотрубок и графена, в том числе с модифицированной поверхностью в кристаллизующиеся полимеры, содержащие гетероциклы, приводит к возникновению вблизи поверхности наполнителя ориентационного упорядочения плоских фрагментов полимерных цепей, что приводит к изменению механических свойств полимера вблизи поверхности наночастиц. Проведено исследование подвижности фуллеренов в полимерном расплаве слабонерупутанных макромолекул термопластичных полимеров.

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке мегагранта Правительства Российской Федерации (Госконтракт № 14.Z50.31.0002). Компьютерное моделирование проведено с использованием вычислительных ресурсов кластера ИВС РАН, суперкомпьютеров МГУ “Ломоносов-1” и “Ломоносов-2”, а также суперкомпьютера МВК НИЦ “Курчатовский