

ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ СТЕКЛОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Айгуль Ильхамовна Шамсиева

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: aigul-shamsieva@mail.ru

Ключевые слова: полибутадиен, температура стеклования, молекулярно-динамическое моделирование.

На сегодняшний день значение полимеров чрезвычайно велико. Полибутадиен – это синтетический эластичный полимер, обладающий высокой износостойкостью. На долю полибутадиенового каучука приходится около четверти общего мирового потребления синтетических каучуков. В основном он используется в производство шин, а также применяется в качестве добавки для улучшения ударной вязкости пластмасс [1]. Одним из ключевых параметров при использовании полимерных материалов является температура стеклования, которая определяется химическим составом и строением полимерных цепей. Данный параметр не является жестко определенной величиной, поскольку переход в стеклообразное состояние происходит в довольно широком диапазоне температур [2]. Трудность определения температуры стеклования можно объяснить тем фактом, что полимерные структуры содержат не только аморфные области, но и кристаллические. Кроме того, для одной и той же структуры свойства могут зависеть от распределения повторяющегося звена. Компьютерное моделирование может помочь в изучении связи между объемными свойствами и межмолекулярными взаимодействиями и, таким образом, приблизить нас к пониманию явления стеклования. В данной работе исследовался монодисперсный аморфный цис-1,4-полибутадиен. Для оценки температуры стеклования было использовано несколько методов: смоделированная дилатометрия, гиперболическая модель, предложенная Уоттсом и Бэконом [3], а также температура стеклования была оценена по зависимостям коэффициента теплового расширения, полной энергии и теплоемкости от температуры. С использованием данных методов была оценена температура стеклования в диапазоне от 10 К до 800 К при давлении до 100 МПа. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Список литературы

1. *Li K.* Aging constitutive model of hydroxyl-terminated polybutadiene coating in solid rocket motor / K. Li, J. Zheng, J. Zhi et al. // *Acta Astronautica*. – 2018. – No. 151. – P. 555–562.
2. *Makhiyanov N.* Glass Transition, Crystallisation, and Melting Temperatures and the Microstructure of Butadiene Rubbers / N. Makhiyanov, E.V. Temnikova // *International Polymer Science and Technology*. – 2010. – No. 37. – P. 17–20.
3. *Lecoutre G.* Hugoniostat and Direct Shock Simulations in cis-1,4-Polybutadiene Melts / G. Lecoutre, C.A. Lemarchand, L. Soulard et al. // *Macromolecular Theory and Simulations*. – 2021. – No. 30. – P. 1–13.