

Моделирование методом Монте-Карло реакции межцепного обмена на межфазной границе в смеси полимеров

Гусева Д.В. , Чертович А.В.* , Кудрявцев Я.В.** , Литманович А.Д.***

студентка

**Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

***Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева РАН, Москва, Россия*

guseva@polly.phys.msu.ru

Существенную роль при смешении полимеров играет степень их совместимости, которая определяет структуру получаемых композитов, а следовательно, и их эксплуатационные свойства. Совместимость может быть значительно улучшена путем реакционной компатибилизации – проведения химических реакций непосредственно в процессе смешения.

В работе методом Монте-Карло исследована простейшая модель несовместимой смеси, исходно состоящая из двух контактирующих фаз гомополимеров А и В, на границе между которыми протекает межцепной обмен (типа алкоголиза), приводящий к образованию мультиблок-сополимера АВ. Впервые для численного исследования реакционно-диффузионных процессов в полимерных системах применен метод непрерывного Монте-Карло моделирования с использованием потенциалов Морса для описания межцепных взаимодействий. Разработана компьютерная программа, которая позволяет исследовать эволюцию молекулярно-массового распределения (ММР) и распределения по длине блоков в зависимости от скорости диффузии и реакции, энергии взаимодействия между звеньями различного типа, начального ММР компонентов смеси.

Моделирование проведено для смеси состава 1:1, содержащей 4096 мономерных звеньев на 256 цепях. Исходные гомополимеры несовместимы и характеризуются ММР Флори. Проанализированы гистограммы распределения по длине блоков в зависимости от времени и расстояния до межфазной границы. Показано, что на начальной стадии происходит межцепной обмен в узком граничном слое, а при уменьшении средней длины блоков до определенного значения начинается проникновение цепей сополимера в чужую фазу. Обсуждаются возможности экстраполяции полученных результатов на системы большего объема, состоящие из более длинных цепей.

Проведенные исследования позволяют впервые визуализировать и детально изучить процесс реакционной компатибилизации вблизи межфазной границы, оценить вклады реакции и диффузии и тем самым представляют значительную ценность для разработки теоретических моделей.