

Закономерности влияния самопроизвольно образующихся кристаллических включений на механические свойства аморфной полимерной матрицы

Д.М. Гусаров¹, В.А. Иванов¹, П.В. Комаров^{2,3}, А.Р. Хохлов¹, Y.-C. Sheen⁴, Y.-S. Lin⁴, C.-H. San⁴

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова¹, Институт элементоорганических соединений РАН², Тверской государственный университет³, Industrial Technology Research Institute⁴

Улучшение эксплуатационных свойств полимеров необходимо как для совершенствования характеристик различных технических устройств, так и для замены дорогостоящих традиционных материалов. В качестве одного из возможных способов повышения прочности полимерных материалов рассматривается формирование упрочняющих доменов *in situ* в процессе микрофазного расслоения полимерной матрицы и добавления различных наполнителей из наночастиц. Однако данный процесс достаточно трудно контролировать, т.к. он зависит от многих параметров. В настоящее время не существует теоретических методов, позволяющих предсказывать физические свойства полимерных материалов в зависимости от химического строения и типа включений. Проведение прямых экспериментальных работ часто требует достаточно много времени и дорогостоящего оборудования для характеристики полученных образцов материалов. В этой ситуации для сужения области экспериментального поиска могут быть задействованы гибридные расчетные схемы, основанные на концепции многомасштабного моделирования. В рамках этого подхода можно изучать практически любые материалы, исходя из их химического строения, количественного соотношения компонентов и физических условий эксплуатации.

В докладе обсуждаются вопросы разработки схемы многомасштабного моделирования полимерных композитов с наночастицами и двухфазных неоднородных полимерных систем. Разрабатываемая схема позволяет строить образцы моделируемых систем заданного композиционного состава. При этом формирование полимерной матрицы происходит в ходе моделирования реакции полимеризации. Построение расчетной схемы выполнено с использованием наших предыдущих разработок в составе Комплекса для компьютерного моделирования физико-химических свойств органических матричных нанокompозитов [<http://fap.sbras.ru/node/4009>].

Моделирование образцов материала при разных внешних нагрузках и температурах позволяет изучать отклик внутренней структуры материала и изучать теплофизические и механические свойства материала. При этом требуется проведение достаточно больших объемов вычислений, что может быть реализовано на современных суперкомпьютерах, позволяющих изучать образцы полимерных нанокompозитов в широком диапазоне параметров.

Для иллюстрации реализации части расчетной схемы в докладе обсуждаются первые результаты выполненных расчетов по изучению влияния химического строения полиуретанов на формируемые в матрице микродомены и механические свойства образца материала.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (соглашение о предоставлении субсидии № 14.613.21.0027 от 28.11.2014 в рамках Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса на 2014-2020 годы»).