

все связи моделировались как жесткие геометрические ограничения фиксированной длины ($l\sigma$), и ван-дер-ваальсовы радиусы звеньев σ считались одинаковыми. Все отличие в свойствах «мономеров» определялось разницей энергетических параметров потенциалов межмолекулярного взаимодействия. Все расчеты выполнялись для цепи длиной $N=256$ звеньев. Цепь сополимера имела регулярное чередование блоков имеющих разное сродство к растворителю. Длины блоков варьировались, однако соотношение мономеров всегда оставалось 1:1. При расчете межмолекулярных и адсорбционных взаимодействий с поверхностью использовалась комбинация потенциала Леннарда-Джонса и потенциала типа Юкавы с радиусом обрезки 5σ .

Выполнено моделирование методом ланжевеновской динамики процесса адсорбции блоксополимера на плоскую однородную поверхность и поверхность с нанесенным рисунком. Для исследования влияния кривизны поверхности было выполнено моделирование адсорбции на наночастицу сферической формы. В работе рассмотрены несколько систем, которые отличаются между собой длиной блока, плотностью, толщиной слоя и диаметром наночастицы. Получены профили распределения плотности звеньев полимера вблизи поверхности. Для наночастиц с размером сопоставимым с радиусом инерции полимерного клубка распределение плотности звеньев вблизи наночастицы сильно отличается от аналогичной зависимости для плоской поверхности. Рассчитаны структурные факторы и парные корреляционные функции для звеньев блоксополимера. Проведено сопоставление результатов моделирования для случая с не адсорбирующей поверхностью.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 07-03-00385-а

ЭНТАЛЬПИЯ МЕЖФАЗНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ГАНИЦЕ РАЗДЕЛА НАНОПОРОШОК ОКСИДА ЖЕЛЕЗА – ПОЛИМЕРНЫЙ РАСТВОР

Овчинникова Н.В., Терзиян Т.В., Сафронов А.П.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Изучение композиционных систем, содержащих частицы нанометрового размера и полимерные компоненты является актуальным направлением современной науки. Так, полимеры различной химической природы используются для стабилизации нанодисперсных систем, модификации поверхности твердой фазы нанопорошков. С другой стороны, нанодисперсные порошки используют в качестве наполнителей для полимеров, с целью создания новых полимерных материалов, сочетающих

свойства наполнителя и полимерной матрицы. Как эффективность стабилизации нанодисперсий, так и возможность получения новых свойств полимерных материалов определяются процессами, происходящими на границе раздела фаз полимер – нанопорошок.

Цель данной работы состояла в калориметрическом изучении энтальпии смачивания нанопорошка оксида железа растворами полимеров. Порошок оксида железа был получен электронным взрывом железной проволоки в воздушной среде и предоставлен лабораторией импульсных процессов Института электрофизики УрО РАН. Аттестация порошка методами электронной микроскопии и низкотемпературной сорбции азота показала, что частицы порошка имеют сферическую форму, средний размер частиц 50 нм, удельная поверхность 50 м²/г. Были приготовлены водные растворы полиакриламида (ПАА) и полиакрилово-й кислотой (ПАК) в широком диапазоне концентраций.

Методом изотермической калориметрии получены энтальпии смачивания дисперсных порошков растворами полимеров. Полученные концентрационные зависимости энтальпии смачивания рассмотрены с учетом сорбционного равновесия между адсорбированными макромолекулами полимеров и макромолекулами в растворе. Используя калориметрические данные, рассчитаны константы сорбционного равновесия и толщина адсорбционного слоя полимера на поверхности частиц дисперсного наполнителя.

Работа выполнена при поддержке гранта CRDF № PG07-005-02 и федерального агентства по образованию грант АВЦП 2.1.1/1535 .

КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ ОРГАНО-НЕОРГАНИЧЕСКИХ ГИБРИДОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИАРИЛЕНСУЛЬФОНОКСИДА.

Охохонин А.В., Тюкова И.С., Суворова А.И.

Уральский государственный университет, Екатеринбург

Органо-неорганические материалы, состоящие из органической полимерной фазы и наноразмерных неорганических частиц, диспергированных в полимерной матрице, относятся к новым и перспективным типам материалов. Их получают в результате гидролиза и поликонденсации алкоксидов элементов Э(OR)_n (где Э – это Si, Ti, Al, Zr и т.д., R = -CH₃, -C₂H₅, -C₃H₇ и т.д.) под действием основных или кислотных катализаторов, приводящих к образованию неорганических частиц в присутствии полимеров, олигомеров или мономеров. Синтез может проводиться как в расплаве, так и в растворе (золь-гель метод). В последнем случае рост неорганической фазы осуществляется в растворе полимера.