

**Т. М. Макарова, Г. И. Макаров, О. С. Бородина,
И. К. Борисенков, А. В. Егоров, А. А. Дьяков,
Е. Е. Учаева, Е. В. Барташевич**

*Южно-Уральский государственный университет (НИУ),
454080, Россия, г. Челябинск, пр. Ленина, 76,
bartashevichev@susu.ru*

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ
ЭПОКСИДНОЙ СМОЛЫ И ТРИЭТИЛЕНТЕТРААМИНА
ПЕРЕД ФОРМИРОВАНИЕМ ПРОСТРАНСТВЕННО-СШИТОГО
ПОЛИМЕРА***

Ключевые слова: молекулярная динамика, эпоксидная смола ЭД-20, триэтилентетраамин.

Эпоксидные смолы широко применяются в технике благодаря удобству обращения и разнообразию свойств. Одно из важнейших их применений состоит в их использовании в качестве связующих при создании разнообразных композитных материалов. Очевидным образом, принципиально важные в таких приложениях механическая прочность эпоксидного связующего и его сродство к поверхности наполнителя, такого как углеродные волокна [1], зависят от структурных характеристик отверждённой эпоксидной смолы – пространственной укладки мономерных звеньев и нековалентных взаимодействий между ними и с поверхностью наполнителя. Однако отверждённые эпоксидные смолы, подобно многим другим полимерам, являются стекловидным телом, отчего их прямое структурное исследование методами рентгеноструктурного анализа едва ли возможно – и тем более невозможно исследование такими методами их взаимодействий с поверхностью наполнителя.

Проблема структурного изучения отверждённой эпоксидной смолы самой по себе и в присутствии поверхности наполнителя может быть решена применением метода молекулярно-динамического моделирования [2]; такие исследования интенсивно развиваются [3–4]. В настоящей работе мы моделировали структуру смеси эпоксидной смолы ЭД-20 [5] и триэтилентетраамина в состоянии, непосредственно предшествующем формированию пространственно-сшитого полимера.

Нами показано, что на основе совокупности методов моделирования равновесной и взвешенной молекулярной динамики возможно построение модели жидкой смолы с равномерно распределенными в её объеме молекулами триэтилентетрамина, причем так, что аминогруппы оказываются сближенными с эпоксидными кольцами 2,2-бис(4-глицидилоксифенил)пропана.

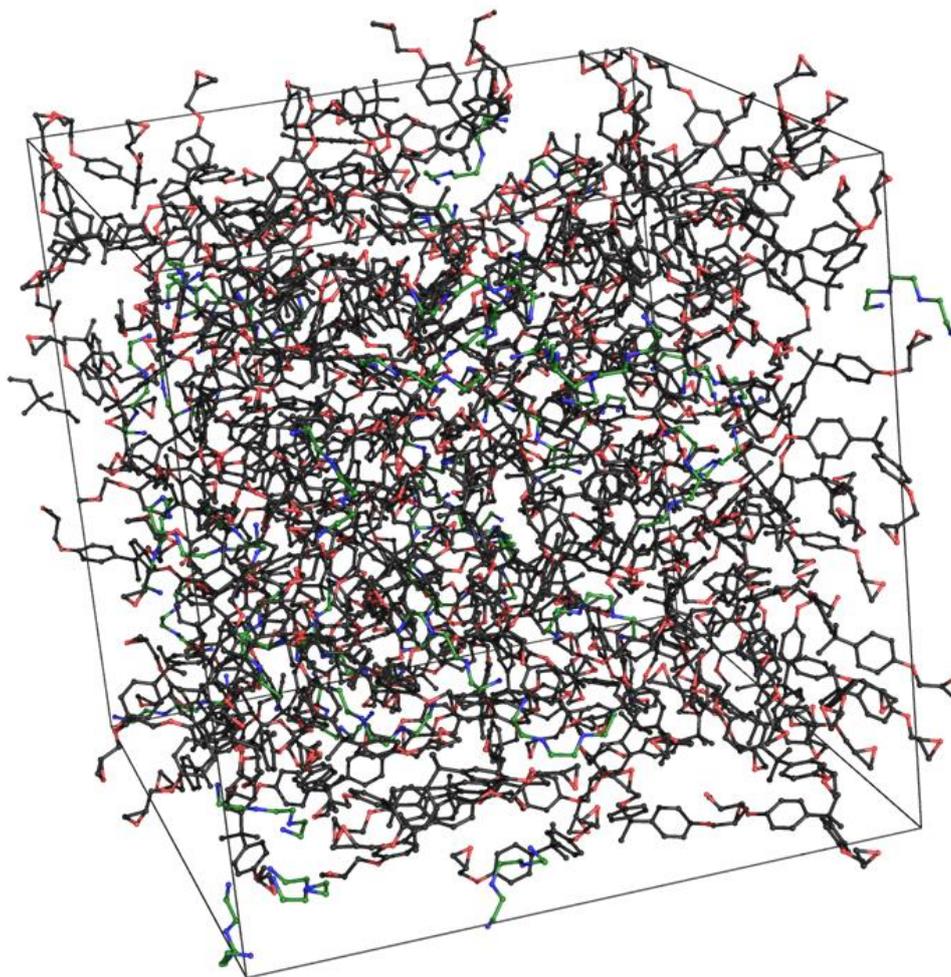


Рисунок. Молекулярно-динамическая модель эпоксидной смолы и триэтилентетрамина перед формированием пространственно-сшитого полимера

На основании этой модели планируется построение молекулярно-динамической модели пространственно-сшитой отвержденной эпоксидной смолы, необходимой для дальнейшего исследования особенностей взаимодействий полимера с поверхностью углеродного волокна.

Список литературы

1. *Abu Z. R. et al.* // Composites Part B: Engineering. 2019. Vol. 161. P. 659–666.
2. *Radue M. S., Varshney V, Baur J. W. et al.* // Macromolec. 2018. Vol. 51. P. 1830–1840.
3. *Jeyranpour F. Alahyarizadeh Gh., Arab B.* // J. Molecul. Graph. Mod. 2015. Vol. 62. P. 157–164.
4. *Meng Z., Bessa M. A., Xia W. et al.* // Macromolec. 2016. Vol. 49. P. 9474–9483.

5. Шологон И. М., Сорокин В. П., Пасальская Н. П., Шухат Л. А. ГОСТ 10587-84. Смолы эпоксидно-диановые неотвержденные. Технические условия (с Изменением N1). (Октябрь 1989).

** Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации и при частичной поддержке гранта РФФИ № 20-03-00240.*

УДК 547.639.5+541.64

**Л. И. Махмутова¹, Д. Н. Шурпик¹,
В. Н. Кижняев², И. И. Стойков¹**

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлевская, 18,
lays_9393@mail.ru,

²Иркутский государственный университет,
664033, Россия, г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1

СИНТЕЗ ПИЛЛАР[n]АРЕНОВ: МАКРОЦИКЛИЗАЦИЯ 1,4-ДИАЛКОКСИ БЕНЗОЛОВ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ АГРЕГАЦИОННЫХ СВОЙСТВ С ТЕТРАЗОЛСОДЕРЖАЩИМИ ПОЛИМЕРАМИ*

Ключевые слова: пиллар[5]арен, самоорганизация, макроциклы, самосборка.

В настоящее время в качестве перспективных носителей для формирования систем целевой доставки лекарственных препаратов рассматриваются полимерные композиции на основе поливинилтетразолов (ПВТ) [1]. Однако остается нерешенной проблема получения на их основе в водных средах стабильных наноразмерных дисперсий [2]. Для создания из полимерных композиций наночастиц с заданной формой и размерами [2] применяются полифункциональные макроциклические соединения [3, 4]. На сегодняшний день наиболее перспективными макроциклическими соединениями являются представители нового класса пара-циклофанов — пиллар[n]арены.

Нами были синтезированы новые незаряженные водорастворимые производные пиллар[5]арена, содержащие 2-гидроксиэтиламидные (3) и 2-гидроксипропиламидные (4) фрагменты.