

Р. Р. Исмаилов, Э. Д. Шакирьянов, С. М. Усманов
(Бирск, БирГСПА). Динамика развития микроглобул в ходе трехмерной полимеризации диаллилзофталата.

На основе статистического метода Монте-Карло разработана математическая модель процесса трехмерной свободно-радикальной полимеризации диаллилзофталата (ДАИФ) [1, 2]. Численный эксперимент по моделированию выполнен на модельном реакторе, представляющем собой кубическую решетку $100 \times 100 \times 100$. Для апробации модели выбран процесс полимеризации ДАИФ в присутствии инициатора перекиси бензоила (ПБ). Доля ПБ составляет 5% по массе. Детальное описание модели приводится в работах [1, 2].

В данной работе представлены результаты динамики развития трехмерной полимерной сетки на начальной стадии. Наши расчеты показали, что длина ребра реактора составляет $\sim 450 \text{ \AA}$, причем мономер занимает 3 узла и 2 ребра, длина ДАИФ равна $\sim 10\text{--}12 \text{ \AA}$.

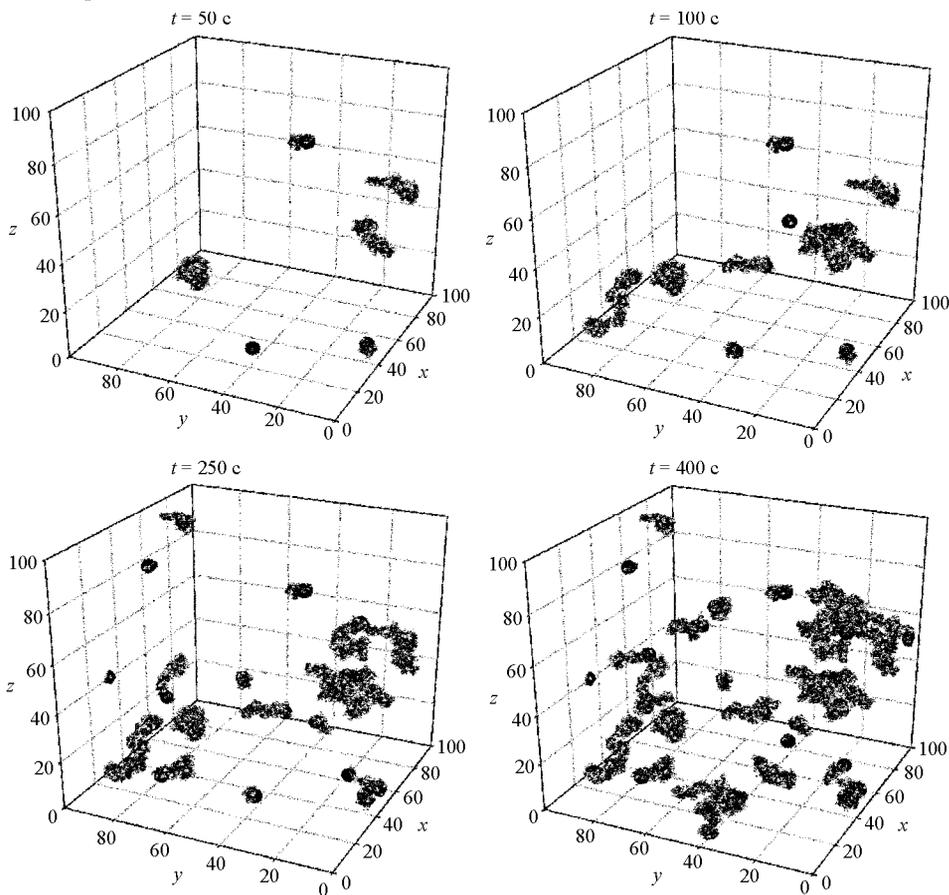


Рис. Динамика развития трехмерной полимерной структуры ДАИФ (● — активный радикал, ■ — менее активный радикал, ◆ — полимер, ▲ — подвешенная двойная связь)

Имитационная модель позволяет проследить за динамикой формирования полимерных микроглобул в реакционном объеме. На рис. представлена визуализация развития микроглобулярной структуры трехмерного полимера ДАИФ в различные моменты времени. Оценочные расчеты показали, что образующиеся микроглобулы имеют средний размер порядка $80\text{--}120 \text{ \AA}$ при $t = 400 \text{ c}$. Разработанная модель трех-

мерной полимеризации тетрафункциональных мономеров дает определенное представление о формировании надмолекулярной структуры полимерного тела в ходе реакционного процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Сивергин Ю. М., Исмаилов Р. Р., Гайсин Ф. Р., Усманов С. М.* Моделирование образования единичного трехмерного структурного элемента в свободно-радикальной полимеризации. — *Высокомолекулярные соединения. Сер. А*, 2008, т. 50, № 1, с. 111–119
2. *Исмаилов Р. Р., Шакирьянов Э. Д., Усманов С. М.* Статистическая модель трехмерной свободно-радикальной полимеризации. — В сб.: *Физика в Башкортостане*. Уфа: Изд-во ИФМиК УНЦ РАН, 2009, в. 4.