

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

Д.М. Гусаров<sup>1</sup>, В.А. Иванов<sup>1</sup>, П.В. Комаров<sup>2,3</sup>, А.Р. Хохлов<sup>1</sup>, Y.-C. Sheen<sup>4</sup>, Y.-S. Lin<sup>4</sup>, C.-H. San<sup>4</sup>

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова<sup>1</sup>, Институт элементоорганических соединений РАН<sup>2</sup>, Тверской государственный университет<sup>3</sup>, Industrial Technology Research Institute<sup>4</sup>

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»).

## **Influence of spontaneously formed crystalline inclusions on the mechanical properties of amorphous polymer matrix**

*Dmitry Gusarov, Viktor Ivanov, Pavel Komarov, Alexei Khokhlov, Yuung-Ching Sheen, Yang-Shan Lin and Cheng-Hung San*

**Keywords:** multiscale computer modeling, polymer nanocomposites, mechanical properties of polymeric materials

One of the possible ways to increase the strength of the polymeric materials is the formation of reinforcement domains treated in situ during the microphase separation of the polymer matrix after adding various fillers. To narrow the field of experimental research, hybrid calculation schemes can be involved based on the concept of multi-scale modeling. In this approach, you can study almost any material on the basis of their chemical structure, the quantitative ratios of the components and physical conditions. The report discusses the development of the scheme of multiscale modeling of polymer composites with nanoparticles and two-phase heterogeneous polymer systems. Simulation of material samples at different external loads and temperatures allows us to study the response of the internal structure of the material and study thermal and mechanical properties of the material. This requires a fairly large amount of computations that can be implemented on modern supercomputers that allow to study samples of polymer nanocomposites in a wide range of parameters. To illustrate the implementation of the scheme, the report discusses the first results of the calculations on the effect of the chemical structure of polyurethanes formed microdomains in the matrix and the mechanical properties of the sample material.