

## РОЛЬ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРОВ

И.И. Злотников<sup>1</sup>, В.М. Шаповалов<sup>2</sup>, И.Н. Ковалёва<sup>2</sup>, Д.Л. Подобед<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого, Гомель, Беларусь, zlotnikov@gstu.by

<sup>2</sup>Государственное научное учреждение «Институт механики металлополимерных систем имени В.А. Белого Национальной академии наук Беларуси», Гомель, Беларусь

<sup>3</sup>Гомельский филиал Университета гражданской защиты МЧС Беларуси, Гомель, Беларусь

Главным условием получения полимерных композиционных материалов (ПКМ) с высокими показателями является обеспечение максимальной силы взаимодействия между поверхностью полимера и наполнителя. Обычно это достигается увеличением механической составляющей межфазного взаимодействия, например, переводом наполнителя в высокодисперсное состояние, что увеличивает разветвленность его поверхности, а также введением реагентов, создающих предпосылки для химического взаимодействия компонентов. Если методы увеличения механической и химической составляющей взаимодействия исчерпаны, то остается только возможность повышения межмолекулярного взаимодействия между поверхностями компонентов композита, что можно достичь подбором полимерной матрицы и наполнителя.

**Цель работы** — рассмотреть силы межфазного взаимодействия полимерной матрицы и наполнителя с точки зрения электромагнитной теории молекулярных сил и использовать полученные результаты для прогнозирования свойств ПКМ.

Наиболее общим способом расчета молекулярных сил взаимодействия двух твердых поверхностей является электромагнитная теория, развитая в работах Е.М. Лифшица [1], где было получено выражение для силы  $F$ , действующей на единицу площади каждого из двух тел, разделенных зазором шириной  $l$ , заполненным третьей средой. Если зазор мал по сравнению с длинами волн, характерными для спектров поглощения этих тел и температуры малы, то формула для силы взаимодействия имеет вид (индексы 1 и 2 относятся к телам, 3 к прослойке) [1]:

$$F(l) = \frac{\hbar}{8\pi^2 l^3} \int_0^\infty [\varepsilon_1(i\xi) - \varepsilon_3(i\xi)][\varepsilon_2(i\xi) - \varepsilon_3(i\xi)] d\xi.$$

Однако экспериментальное определение комплексных диэлектрической проницаемости  $\varepsilon''_{1,2,3}(\omega)$  и последующее вычисление силы является трудоемким процессом, поэтому в различных исследованиях предлагаются приближенные формулы для расчета силы взаимодействия. В монографии [2] предложена приближенная формула, в которой принимается во внимание поглощение только в области оптических частот:

$$F(l) = \frac{\hbar}{16\pi^3 \sqrt{2}} \frac{\omega_0(\varepsilon_{10} - \varepsilon_{30})(\varepsilon_{20} - \varepsilon_{30})}{(\varepsilon_{10} + \varepsilon_{30})^{1/2}(\varepsilon_{20} + \varepsilon_{30})^{1/2}[(\varepsilon_{10} + \varepsilon_{30})^{1/2} + (\varepsilon_{20} + \varepsilon_{30})^{1/2}]},$$

где  $\omega_0$  — главная частота поглощения в спектрах всех трех веществ,  $\varepsilon_{10}$ ,  $\varepsilon_{20}$  — статические диэлектрические проницаемости тел и прослойки —  $\varepsilon_{30}$ .

В «идеальном» ПКМ молекулярное взаимодействие протекает на границе полимера и наполнителя, причем можно считать, что между ними находится вакуум. В реальном ПКМ между поверхностью наполнителя и полимерной матрицы может присутствовать прослойка третьего вещества — либо специально введенного модификатора, либо образующаяся за счет окислов, адсорбированных загрязнений и продуктов, выделяющихся из полимера. Определение диэлектрических свойств этой прослойки, представляет собой очень трудную задачу при прогнозировании свойств ПКМ. Если применить последнюю формулу для «идеального» ПКМ, то диэлектрическую проницаемость  $\varepsilon_{30}$  следует принять за единицу, а ширину зазора принять равной среднему межатомному расстоянию. В этом случае:

$$F(l) = \frac{\hbar}{16\pi^3 \sqrt{2}} \frac{\omega_0(\varepsilon_{10} - 1)(\varepsilon_{20} - 1)}{(\varepsilon_{10} + 1)^{1/2}(\varepsilon_{20} + 1)^{1/2}[(\varepsilon_{10} + 1)^{1/2} + (\varepsilon_{20} + 1)^{1/2}]},$$

$\varepsilon_{10}$ ,  $\varepsilon_{20}$ , — диэлектрические проницаемости полимера и наполнителя.

Проанализировав поведение функции  $F(l)$  в двух крайних случаях, когда диэлектрические проницаемости полимера и наполнителя очень близки по величине  $\varepsilon_{10} \approx \varepsilon_{20}$ , например при наполнении эпоксидной смолы диоксидом кремния ( $\varepsilon_{10} \approx \varepsilon_{20} \approx 3,8$ ) и когда отличаются очень сильно  $\varepsilon_{10} \gg \varepsilon_{20}$ , как в случае наполнения полиолефинов ( $\varepsilon_{10} \approx 2,2$ ) оксидом алюминия ( $\varepsilon_{20} \approx 10$ ) можно сделать заключение, что для того, чтобы сила взаимодействия полимера и наполнителя была как можно больше, их диэлектрические проницаемости должны быть как можно ближе по величине. Если поглощение происходит не на одной общей частоте  $\omega_0$ , а на нескольких, то их вклад в силу взаимодействия суммируется.

Таким образом, чтобы межфазное молекулярное взаимодействие полимерной матрицы и наполнителя было максимальным необходимо, чтобы:

- в спектрах полимера и наполнителя было как можно больше общих полос поглощения;
- если максимумы полос поглощения обоих веществ не совпадают, необходимо чтобы близкие полосы перекрывались как можно сильнее;
- величины статических диэлектрических проницаемостей полимера и наполнителя должны быть как можно ближе по величине.

1. Труды Е.М. Лифшица / Под ред. Л.П. Питаевского, Ю.Г. Рудого. – М.: Физматлит, 2004. – 648 с.
2. Израелашвили Дж. Межмолекулярные и поверхностные силы / Дж. Израелашвили. – М.: Научный мир, 2011. – 457 с.