

МЕЗОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВИТРИМЕРА НА ОСНОВЕ ДИГЛИЦИДИЛОВОГО ЭФИРА БИСФЕНОЛА А

М.Д. Малышев¹, П.В. Комаров^{1,2}

¹Тверской государственный университет, г. Тверь

²Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН,
г. Москва

Выполнена разработка мезомасштабной модели полимерной сетки на основе диглицидилового эфира бисфенола А и отвердителя трикарбоновой жирной кислоты. Для реализации расчетов использовалась реакционная версия диссипативной динамики частиц. Подготовленные образцы полимерной сетки использовались для изучения процесса сварки. Для контроля целостности системы проводился контроль числа несущих нагрузку цепей в объеме ячейки. В работе показано, что в результате реакции обмена связями происходит восстановление целостности полимерной сетки за счет перераспределения разорванных связей в объеме ячейки.

Ключевые слова: витримеры, сетчатые полимеры, мезоскопическая модель, диссипативная динамика частиц.

Полимерные материалы обычно классифицируются как термопласты или реактопласты (термореактивные материалы) в зависимости от топологического строения полимерной матрицы [1]. В термопластах полимерные цепи химически не связаны друг с другом, что позволяет материалу проявлять свойства вязкоупругой жидкости при нагревании выше температуры стеклования T_g (или температуры плавления T_m , если полимер полукристаллический) [2,3]. Молекулярная подвижность в расплавленном состоянии позволяет перерабатывать и повторно использовать материалы на основе термопластичных полимеров [4]. Однако, отсутствие сшивки приводит к плохой стойкости полимеров к жидким агрессивным средам (растворителям) и растрескиванию, что делает термопласты непригодными для практической деятельности, требующей высоких механических свойств и термической стабильности, устойчивости к химическим воздействиям и воздействиям окружающей среды.

Для устранения вышеперечисленных ограничений сомомеры и полимерные цепи можно соединять друг с другом ковалентными химическими связями (сшивками), в результате чего образуются так называемые реактопласты [5]. Сшивание позволяет формировать трехмерную сетку, в которой диффузия мономеров и полимерных цепей подавляется. Ограниченная подвижность трехмерной сетки делает термореактивные материалы востребованными для практического

применения в качестве высокопрочных и химически стойких конструкционных материалов [6].

В случае ковалентных сшивок между мономерами изделия из сетчатых полимеров в определенном смысле являются одноразовыми [7,8]. Их нельзя переработать и изменить их форму, поскольку они не текут при нагревании и не растворяются ни в одном из растворителей из-за соединения макромолекул в единую сеть. Поэтому с точки зрения разработки перерабатываемых полимерных материалов особый интерес представляют сшитые полимерные матрицы с динамическими ковалентными связями, такие как витримеры. Первые витримеры были получены путем отверждения мономера диэпоксида - диглицидилового эфира бисфенола А (DGEBA) - либо с глутаровым ангидридом [9], либо со смесью дикарбоновых и трикарбоновых кислот в присутствии катализаторов. Значительный вклад в изучении этих полимеров сделаны в лабораториях Лейблера и Дю Пре [10,11]. Реакцию обмена связями между сомономерами (перезтерификации) можно регулировать, изменяя концентрацию или природу катализатора и температуру. При некоторой температуре T_v время релаксации связей полимерной сетки, контролируемое скоростью обменной реакции, становится больше, чем масштабы времени, доступные на эксперименте. Таким образом, при температурах ниже T_v топология сетки замораживается. Выше температуры T_v благодаря протеканию этой реакции можно не только повторно обрабатывать изделия из термореактивных материалов и каучуков и изменять их форму, но также «залечивать» дефекты материала, такие как трещины, и производить сварку изделий из витримеров. В результате при температурах ниже T_v новое состояние становится фиксированным, проявляя хорошо выраженный эффект памяти формы.

Для получения материалов на основе витримеров, кроме непосредственно экспериментальных исследований, является важным развитие теоретических моделей, которые могли бы воспроизводить их свойства с учетом протекания реакции обмена связями. Поскольку скорость протекания реакции обмена связями является достаточно медленным процессом [12], в этом случае хорошей альтернативой является использование методов мезоскопического моделирования, позволяющих существенно сократить объемы вычислений.

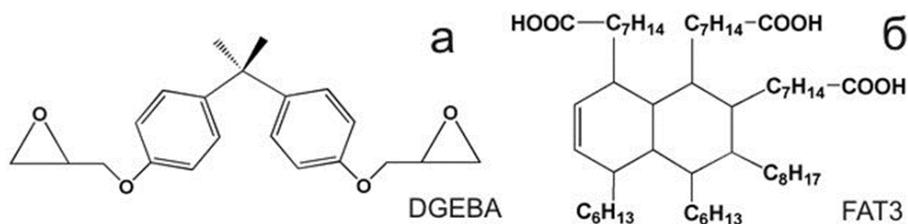


Рис. 1. Структурные формулы а) бифункционального диглицидилового эфира бисфенола А (эпоксидная смола), и б) трикарбоновой жирной кислоты (отвердитель)

В данной работе выполнено построение мезоскопической модели витримера. В качестве метода моделирования использовался метод диссипативной динамики частиц (ДДЧ), первоначально предложенный Хугербругге и Кёльманом [13-16]. Для моделирования реакции обмена связями мы модифицировали реакционную версию ДДЧ [17]. Разработанная модель ориентирована на изучение восстановления целостности (эффекта “залечивания”) образца витримера. В качестве прототипов сомономеров полимера мы взяли молекулы эпоксидной смолы бифункционального диглицидилового эфира бисфенола А (DGEBA) и трикарбоновой жирной кислоты (FAT3), используемой в качестве отвердителя. Их структурные формулы показаны на рис. 1. На рис. 2 и рис. 3 схематически показаны реакции отверждения и обмена связями в смеси DGEBA/FAT3 [11].

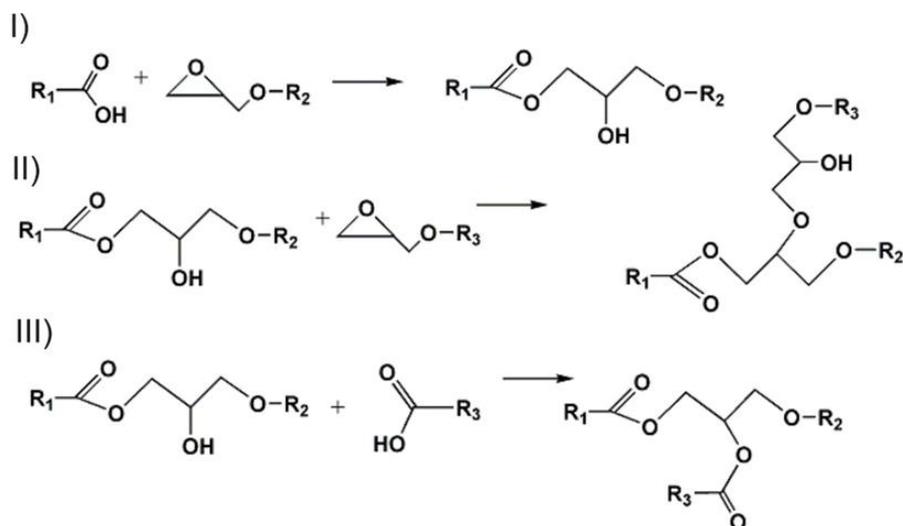


Рис. 2. Реакция отверждения DGEBA/FAT3 [11]. I) аддитивная этерификация по эпоксидным кольцам (DGEBA-FAT3), II) этерификация эпоксигрупп (гомополимеризация DGEBA-DGEBA), III) этерификация кислот по гидроксильным группам по Фишеру

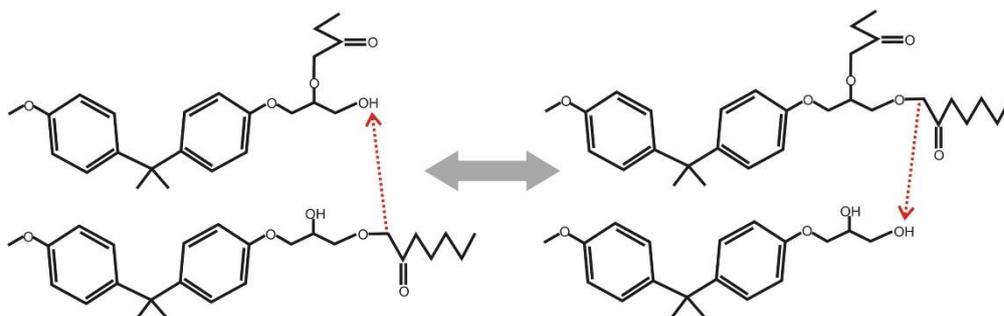


Рис. 3. Схема реакции обмена связями в полимерной сетке на основе сомономеров DGEBA и FAT3 [11]

Для построения мезоскопической модели полимерной системы в рамках метода ДДЧ необходимо выполнить преобразования исходных молекулярных объектов (исходя из особенностей их строения) в упрощенное крупнозернистое представление. Это осуществляется путем выделения и замены групп атомов или целых фрагментов молекул на бесструктурные частицы одинакового диаметра σ и массы m , называемых бидами, с сохранением основных особенностей исходных химических структур. Такой подход доказал свою достоверность и эффективность при моделировании различных молекулярных систем, в том числе и при моделировании механических свойств полимерных нанокомпозитов [17]. Здесь и далее мы полагаем, что $\sigma = 1$, $m = 1$ и $k_B T = 1$ (k_B – константа Больцмана, T – температура). Это определяет масштаб единицы времени $\tau = \sigma \sqrt{m / k_B T} = 1$. Биды взаимодействуют друг с другом посредством попарно аддитивных сил, которые локально сохраняют импульс и приводят к правильной гидродинамике, а именно стандартных сил: $F_i^{(C)}$ – консервативных, диссипативных $F_i^{(D)}$, случайных $F_i^{(R)}$ и дополнительных консервативных сил. Для учета структурных особенностей полимерной сетки и формы наночастиц дополнительно к стандартным ДДЧ-силам мы учитываем дополнительный набор двух- и трехчастичных сил: деформации валентной связи и деформации валентного угла. Поскольку при моделировании реакции сшивания важно учитывать усадку полимерной матрицы, при построении полимерной сетки был задействован баростат Ланжевена $N\sigma T$ для учета флуктуаций размера ячейки моделирования [18].

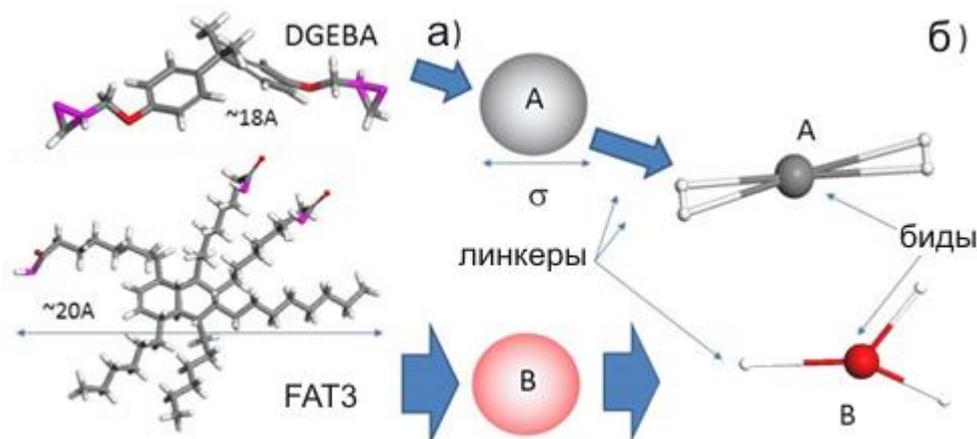


Рис. 4. Моделируемая система содержит два типа полимеризующих сомономеров: а) DGEBA и трикарбоновую жирную кислоту. б) Для простоты в крупнозернистом представлении они построены из одной ДДЧ-частицы и 4х и 3х линкеров. Линкеры - это вид ДДЧ-частиц, которые могут образовывать ковалентные связи между мономерами

Наличие валентных связей между бидами определяется структурой исходных молекулярных объектов, кроме этого, они могут образовываться и разрываться при моделировании химических реакций, например, при моделировании формирования полимерных сеток. В данном исследовании для построения полимерной матрицы используется концепция так называемой «мезомасштабной химии», подробно описанной в [17] и неоднократно применявшейся нами при моделировании различных систем. Остановимся на ее основных моментах. Чтобы смоделировать реакцию полимеризации, мы используем составные («композитные») биды, состоящие из обычных ДДЧ-бидов и полувиртуальных частиц, называемых «линкерами». Линкеры связаны с ДДЧ-бидами валентными связями. ДДЧ-биды также могут быть связаны друг с другом в результате процедуры огрубления (описанной далее) для имитации формы исходных молекулярных фрагментов. Они участвуют во всех типах межчастичных взаимодействий. Линкеры — это полувиртуальные частицы, участвующие во внутримолекулярных взаимодействиях деформации валентных связей и валентных углов, кроме этого, они могут образовывать новые ковалентные связи, число которых определяется реакционной способностью атома, которому сопоставляется конкретный линкер в исходной химической структуре.

При подготовке молекулярных структур сомономеров DGEBA и FAT3 выполнялась предварительная оптимизация их геометрии. Атомы, участвующие в химической реакции сшивания, были помечены как "реакционные" для соблюдения условия "химической эквивалентности"

атомистической структуры сомономеров и их мезоскопических моделей. При отображении атомистических структур реакционным атомам сопоставляются "линкеры" с соответствующей валентностью. С использованием выбранного огрубления сгенерированные сомомеры DGEBA и FAT3 содержат по одному ДДЧ-биду и соответственно 4 и 3 линкера с валентностью 1. При этом средний размер сомономеров определяет характерный масштаб в построенных образцах $\sigma \approx 20 \text{ \AA}$. Полученные мезоскопические модели сомономеров показаны на рис. 4б. Следует отметить, что ДДЧ-бидам приписывается логический тип, в нашей модели соответственно А и В.

Реакционная способность приписывается непосредственно ДДЧ-бидам, которая определяется заданной вероятностью w_{ij} . Реакция формирования полимерных сеток при отверждении эпоксидной смолы моделируется следующим образом. Если два линкера, частицы i и j , сближаются на расстояние меньше радиуса отсечки R_r реакции (см. рис. 5), то эти линкеры принадлежат ДДЧ-бидам, которым разрешено реагировать друг с другом, и их валентность не нулевая. Далее генерируется случайное число, и если оно меньше w_{ij} , то эти линкеры связываются ковалентной связью и их валентность уменьшается на единицу. В ходе данной разработки мы ввели в модель возможность выключения ковалентных связей, сформировавшихся в ходе моделирования реакции сшивания полимерной матрицы, с последующей возможностью проведения повторной полимеризации, например, для образцов, подвергнутых механической деформации.

При разработке компьютерной модели были использованы следующие соображения. Полимерная сетка может быть представлена сшивкой сомономеров эпоксидной смолы и отвердителя. При этом связи, образующиеся в системе, допускают возможность ассоциативного обмена. Это означает, что связи между выбранными бидами могут быть разорваны с одновременным образованием новой связи с участием бида DGEBA разорванной связи (см. рис. 3).

Моделирование реакции обмена связи осуществляется следующим образом. Если два линкера с индексами i и j приближаются друг к другу на расстояние, меньшее, чем радиус отсечки реакции R_r (см. рис. 5), то инициируется процедура обмена связями. Она выполняет следующие действия, описанные ниже:

- 1) Выполняется проверка. Один из линкеров (i или j) должен иметь ненулевую валентность, второй линкер из пары (i или j) должен, наоборот, быть связан (т. е. иметь нулевую валентность);
- 2) Линкер с ненулевой валентностью должен быть соединен с бидом ДДЧ-частицы;
- 3) Если выполняется второе условие, линкеры сортируются. Номер линкера с ненулевой валентностью сохраняется в указателе i^* , а номер линкера с нулевой валентностью сохраняется в указателе j^* ;

- 4) Производится поиск линкера, который связан с линкером с индексом $*j$, найденный линкер сохраняется в указателе k^* ;
- 5) Если один из линкеров принадлежит эпоксидной смоле, а другой - жирной кислоте, эпоксидный линкер сохраняется в указателе j^* , а второй - в k^* . В противном случае выполнение процедуры прекращается;
- 6) Если шаги 1-6 выполнены, генерируется случайное число $rand$;
- 7) Если $rand > w_{i^*j^*}$, реакция обмена не проводится, и процедура завершается;
- 8) Если $rand < w_{i^*j^*}$, происходит обмен связями. Затем выполняются следующие действия:
 - а. Валентность линкера i^* установлена равной нулю, валентность j^* установлена равной 1 (см. рис. 5б);
 - б. Число j^* ищется в списке связей. Затем число j^* заменяется на i^* ;
- 9) Завершение процедуры.

В предложенном подходе моделирования реакции обмена связями мы можем косвенно учитывать концентрацию катализатора посредством присвоения метки, передающейся при реализации акта обмена связями от мономера FAT3 со свободной связью к мономеру FAT3 у которого разрывается связь. В качестве метки можно использовать метку валентности. В этом случае после завершения формирования сетки все свободные валентности в системе зануляются. Затем, валентности равные единице назначаются заданному числу линкеров мономерам FAT3. Такие линкеры в дальнейшем будем называть радикалами.

Для силовых констант потенциалов деформации валентной связи и деформации валентного угла для моделей мономеров и наночастиц мы использовали следующие значения: $K_{\alpha}^{(bond)} = 200 k_B T / \sigma^2$ и $K_{\alpha}^{(angle)} = 2 k_B T / rad^2$. Выбор таких значений позволяет обеспечить стабильность геометрии мезоскопических моделей мономеров и наночастиц. В случае межмолекулярных связей значение жесткости валентной связи определялась как $2K_{\alpha}^{(bond)}$, в качестве равновесной длины межмономерных связей мы использовали значение 0.12σ (что соответствует равновесной типичной длине С-С связи в химических соединениях [22]).

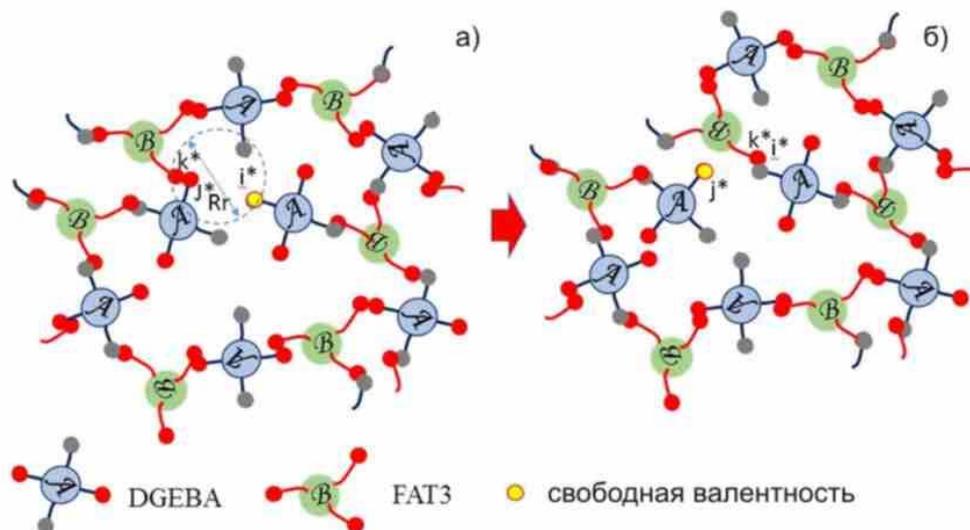


Рис. 5. Схема, иллюстрирующая работу алгоритма моделирования реакции обмена связей: а) сближение линкеров на расстоянии радиуса отсечки R_r , линкер с номером i^* имеет валентность, равную 1, линкер j^* имеет валентность, равную 0; б) результат обменной реакции

Для завершения построения мезоскопической модели нанокompозита необходимо определить силовые константы a_{ij} консервативной силы [13-17]. Поскольку при построении мезоскопической модели мы пренебрегаем детализацией химического строения молекулярной системы на атомном уровне, значение этих констант являются основными параметрами, определяющими смешиваемость основных компонент системы. В случае среднечисленной плотности системы $\rho = 3$ они выражаются через параметры Флори-Хаггинса χ_{ij} [19,20]: $a_{ij} = 25 + 3.497\chi_{ij}k_B T$. Когда $\chi_{ij} \sim 0$ ($a_{ij} \sim 25$), биды соответствующих подсистем могут хорошо смешиваться. В случае $\chi_{ij} > 0.5$ соответствующие подсистемы стремятся расслоиться.

Оценка χ_{ij} была выполнена в рамках расширенной теории Флори – Хаггинса [21] с использованием валентно-силового поля PCFF [22] и методики расчетов, описанной в [23]. В этом случае значение χ_{ij} дается выражением: $\chi_{ij} = E_{mix}(ij)/RT$, где

$$\chi_{ij} = \frac{V_{ref}(\delta_i - \delta_j)^2}{RT}, \quad (1)$$

здесь V_{ref} — значение молекулярного объема, сопоставляемого одному биду, R – газовая постоянная, T – абсолютная температура. Расчет параметров растворимости и среднего молекулярного объема мономеров эпоксидной смолы и отвердителя с использованием метода Аскадского

дает $V_{\text{ref}} = 591.5 \text{ см}^3/\text{Моль}$, $\delta_{\text{DGEBA}} \sim 20.3 \text{ (Дж/см}^3)^{1/2}$ и $\delta_{\text{FAT3}} \sim 19.6 \text{ (Дж/см}^3)^{1/2}$. Это дает $\chi_{\text{DGEBA,FAT3}} \sim 0.11$. Таким образом, с учетом выше приведенной оценки можно полагать, что мономеры DGEBA и FAT3 хорошо смешиваются, поэтому мы выбрали $a_{\text{DGEBA,FAT3}} = 25$.

Для тестирования разработанной модели мы построили мезоскопические модели образцов матрицы. Отношение объемных долей DGEBA : FAT = 5/7 : 2/7 было выбрано для получения полимера с максимальной степенью конверсии. Начальные состояния реакционной смеси с полной плотностью $\rho_0=3$ генерировались заданием случайных координат центров масс сомономеров в ячейке с длиной ребра 11 sigma . Заметим, что с учетом размеров атомистических моделей сомономеров DGEBA и FAT3 единица масштаба соответствует $\text{sigma} \sim 20 \text{ \AA}$, таким образом длина ребра ячейки эквивалентной атомистической модели составляет $\sim 220 \text{ \AA}$. Для интегрирования системы уравнений движения (1) используется модифицированный метод Верле с шагом $dt = 0.002 \text{ \tau}$.

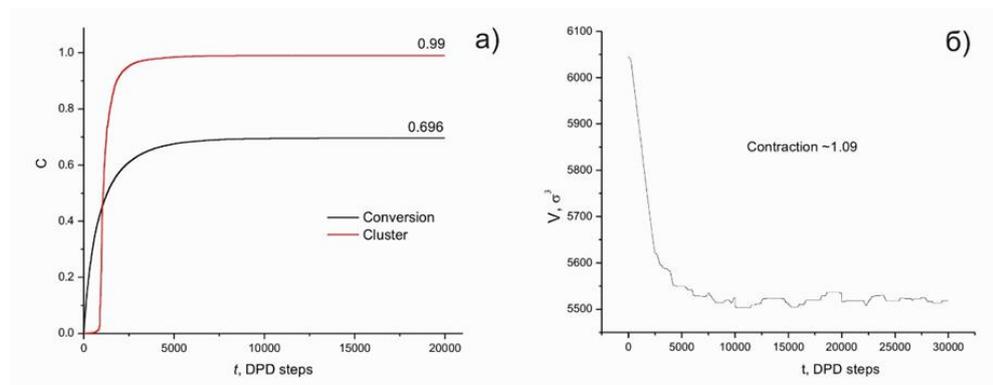


Рис. 6. Степень конверсии матрицы от времени реакции сшивания

Для построения сшитой полимерной сетки процедура, реализующая химическую реакцию, запускалась через каждые 1000 ДДЧ-шагов, что достаточно для релаксации образующихся связей и формирующихся субцепей полимерной сетки, поскольку в этих условиях концентрация реагентов остается примерно постоянной. Были установлены следующие значения вероятности протекания химической реакции между непрореагировавшими линкерами $w_{\text{DGEBA,FAT3}} = 0.0025$ и $w_{\text{DGEBA,DGEBA}} = 0.001$ (определяющие относительное количество возникающих связей). Протекание реакции контролировалось посредством расчета удельной доли размера наибольшего кластера. На рис. 6а показано изменение этого значения для чистой полимерной матрицы. Общее время моделирования этого этапа составляет 3 000 000 ДДЧ-шагов. Как видно из рисунка, рост полимерной сетки практически останавливается по достижении 1 000 000 ДДЧ-шагов. Максимальная степень конверсии образцов достигла предела ~ 0.65 . Данное значение

обусловлено тем, что по мере роста числа связей в системе диффузия сомономеров замедляется в силу стерических эффектов (когда реагент А не может подойти к реагенту В). Также отметим, что в ходе реакции полимеризации происходит небольшое сжатие объема образцов порядка 2% по отношению к исходному размеру (см. рис. 6б), которое прекращается при достижении максимальной степени конверсии, что является характерным для материалов на основе эпоксидных смол.

Построенные образцы полимерной сетки использовались для изучения процесса сварки. Для этого построенные системы разрезались посредством разрыва связей между сомономерами, один из которых соприкасается с плоскостью ($x = 0$). Для контроля целостности системы проводился контроль плотности числа несущих нагрузку цепей (ННЦ) вдоль направлений x , y , z . Кратко остановимся на понятии ННЦ.

Особенности химического строения полимерных сеток определяют их топологическое строение. Структуру полимерных сеток можно охарактеризовать с использованием подхода, предложенного П. Г. Халатуром [17]. При проведении топологического анализа полимерные сетки рассматриваются как совокупность одинаковых вершин, соединенных двунаправленными ребрами. Это позволяет рассматривать их как неориентированные графы. В сильно сшитых полимерах топологические структуры, такие как «простые циклы», играют ключевую роль в формировании механического отклика системы [24,25]. Простой цикл определяется как кольцо с кратчайшими топологическими расстояниями между вершинами. Поскольку мы используем периодические граничные условия, среди простых циклов можно выделить особый тип. Действительно, если двигаться по циклу в трехмерной периодической системе, то можно достичь как одной и той же вершины (откуда мы начали свой путь), так и вершины, которая не находится в исходном образе системы. Такие циклы называются несущими нагрузку цепями и могут рассматриваться как цепочки, которые проходят через весь объем ячейки и соединяются через периодические граничные условия. В случае полимерных сеток с высокой степенью сшивки именно ННЦ отвечают за передачу нагрузки через объем ячейки моделирования. Чем больше ННЦ в системе, тем большую нагрузку необходимо приложить для ее деформации.

При проведении топологического анализа мы использовали методику из работ [24,25]. На рис. 7 показаны зависимости числа несущих нагрузку цепей n как функция числа ДДЧ-шагов. Представленные на рисунке значения нормированы на среднее число ННЦ $\langle n \rangle$ в системе до разреза образца плоскостью $x = 0$.

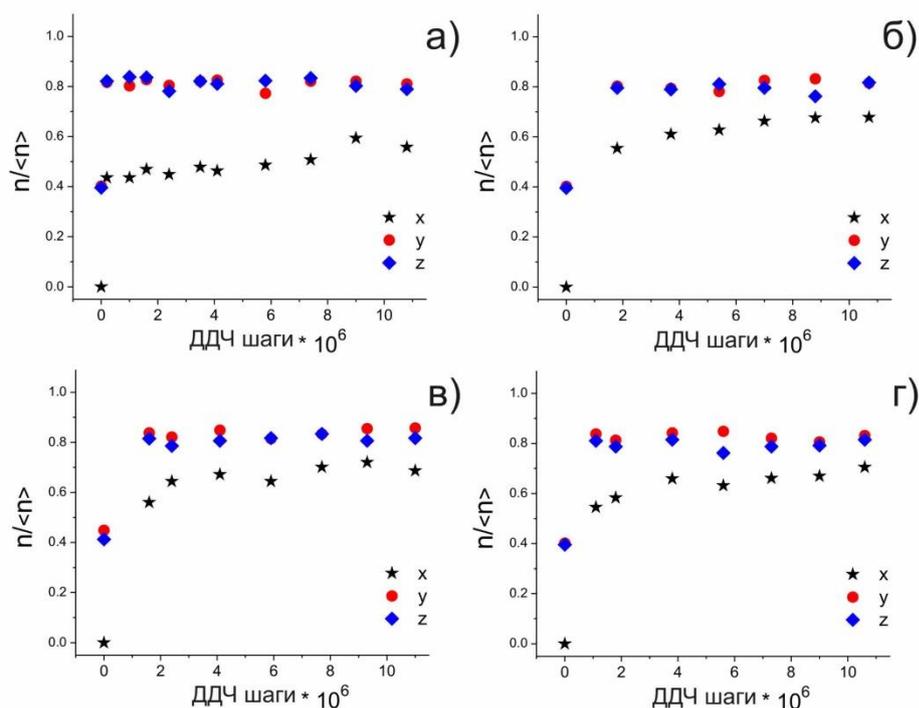


Рис. 7. Число несущих нагрузку цепей по направлениям x, y, z (нормированная на среднее число ННЦ в ячейке до разреза плоскостью $x = 0$) как функция числа ДДЧ-шагов для случая а) одного радикала, б) 5, в) 10 и г) 20 радикалов

Как видно из рис. 7, число ННЦ по направлениям (y и z) параллельных плоскости секущей ячейку остается неизменным. При этом число ННЦ по направлению x достаточно быстро восстанавливается и становится близким к значениям $n_y / \langle n \rangle$ и $n_z / \langle n \rangle$. Вместе с тем увеличение числа радикалов в системе уменьшает время восстановления целостности системы. Таким образом, представленная в данной работе ДДЧ-модель витримера, в которой реализован процесс реакции обмена связей между сомономерами DGEBA и FAT3, демонстрирует возможность восстановления целостности полимерной сетки за счет перераспределения разорванных связей в объеме ячейки.

Мы планируем использовать разработанную модель для детального изучения процесса восстановления повреждений в витримерах, их структурных и механических свойств.

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН) и при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Авторы также выражают признательность П. Г. Халатуру за программы топологического анализа и программу DPD_NPT_chem.

Список литературы

1. Аскадский А.А., Хохлов А.Р. // Введение в физико-химию полимеров. – М.: Научный мир, 2009. С. 384.
2. Angell C.A. // Science. 1995. V. 267. № 5206. P.1924.
3. Colby R.H., Rubinstein M. // Polymer physics. – New-York US: Oxford University, 2003. P. 274.
4. Biron M. // Thermoplastics and thermoplastic composites. – Oxford UK: Elsevier, 2018. P. 1035.
5. Dodiuk H., Goodman S.H. // Handbook of thermoset plastics. – San Diego USA: Elsevier, 2013. P. 761.
6. Kutz M. Applied plastics engineering handbook: processing, materials, and applications. – Oxford UK: Elsevier, 2016. P. 743.
7. Ibarra R.M. // Chapter 20 - Recycling of thermosets and their composites. Thermosets. – Oxford UK: Elsevier, 2018. P. 639.
8. Pickering S.J. // Composites Part A: Applied Science and Manufacturing. 2006. V. 37. № 8. P.1206.
9. Montarnal D., Capelot M., Tournilhac F., Leibler L. // Science. 2011. V. 334. № 6058. P. 965.
10. Capelot M., Unterlass M.M., Tournilhac F., Leibler L. // ACS Macro Lett. 2012. V. 1. № 7. P. 789.
11. Capelot M., Montarnal D., Tournilhac F., Leibler L. // J. Am. Chem. Soc. 2012. V. 134. № 18. P. 7664.
12. Hammer L., Zee N.J.V., Nicolay R. // Polymers. 2021. V. 13. № 3. P. 396.
13. Groot R.D., Warren P.B. // J. Chem. Phys. 1997. V. 107. № 11. P. 4423.
14. Hoogerbrugge P.J., Koelman J.M.V.A. // Europhys. Lett. 1992. V. 19. № 3. P. 155.
15. Koelman J.M.V.A., Hoogerbrugge P.J. // Europhys. Lett. 1993. V. 21. № 3. P. 363.
16. Español P., Warren P. // Europhys. Lett. 1995. V. 30. № 4. P. 191.
17. Gavrilov A.A., Komarov P. ., Khalatur P.G. // Macromolecules. 2015. V. 48. № 1. P. 206.
18. Kriksin Y.A., Khalatur P.G., Neratova I.V., Khokhlov A.R., Tsarkova L.A. // J. Phys. Chem. C. 2011. V. 115. № 51. P. 25185.
19. Flory P.J. // J. Chem. Phys. 1941. V. 9. № 8. P. 660.
20. Huggins M.L. // J. Chem. Phys. 1941. V. 9. № 5. P. 440.
21. Blanco M.J. // J. Comput. Chem. 1991. V. 12. № 2. P. 237.
22. Sun H. // Macromolecules. 1995. V. 28. № 3. P. 701.
23. Komarov P., Markina A., Ivanov V. // Chem. Phys. Lett. 2016. V. 653. P. 24.
24. Komarov P.V., Khalatur P.G., Khokhlov A.R. // Polym. Adv. Technol. 2021. V. 32. № 10. P. 3922.
25. Malyshev M.D., Guseva D.V., Vasilevskaya V.V., Komarov P.V. // Materials. 2021. V. 14. № 21. P. 6637.

Об авторах:

МАЛЫШЕВ Максим Дмитриевич — аспирант кафедры физической химии, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», e-mail: bggf@bk.ru.

КОМАРОВ Павел Вячеславович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики, Тверской государственный университет, ведущий научный сотрудник лаборатории физической химии полимеров ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А. Н. Несмеянова РАН», e-mail: pv_komarov@mail.ru.

MESOSCOPIC MODELING OF A VITRIMER BASED ON DIGLYCIDYL ETHER BISPHENOL A

M. D. Malyshev¹, P. V. Komarov^{1,2}

¹Tver State University, Tver

² A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds
of Russian Academy of Sciences, Moscow

A mesoscale model of a polymer network based on bisphenol A diglycidyl ether and a tricarboxylic fatty acid hardener has been developed. To implement the calculations, the reaction version of the dissipative particle dynamics is used. The prepared samples of the polymer network were used to study the welding process. To control the integrity of the system, the number of load-bearing circuits in the cell volume is monitored. It is shown in the work that as a result of the bond exchange reaction, the integrity of the polymer network is restored due to the redistribution of the distribution of broken bonds in the volume of the cell.

Keywords: *vitrimers, reticulated polymers, mesoscopic model, dissipative particle dynamics.*