

УДК 541.64

РАЗРАБОТКА ГИБРИДНОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕРОВ И АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ НАНОТРУБОК ГАЛЛУАЗИТА

П.В. Комаров^{1,2}, В.А. Иванов³

¹Тверской государственной университет

²ИНЭОС, РАН, г. Москва

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Рассмотрены вопросы построения крупномасштабной модели нанокomпозитов на основе полимеров и алюмосиликатных нанотрубок с целью предсказания пространственного распределения наполнителя на ранних стадиях формирования материала. Для проведения тестовых расчетов была выбрана смесь мономеров эпоксидной смолы диэпоксида тетрагидробензилового эфира тетрагидробензойной кислоты и отвердителя гексагидро-4- метилфталевого ангидрида.

Ключевые слова: нанокomпозиты, наночастицы, компьютерное моделирование.

Галлуазит – природный экологически чистый наноматериал, состоящий из многослойных алюмосиликатных нанотрубок (НТ) [1–3]. Также в литературе есть сведения о наночастицах галлуазита нитеобразной, сферической, плоской, дискообразной формы и др. [3]. Галлуазит содержится в месторождениях каолинита, который образуется в земной коре в результате выветривания горных пород, сформированных под действием высокого давления, в слоях диоксида кремния и оксида алюминия. Стоимость получения нанотрубок галлуазита (НТГ) ниже, чем у углеродных нанотрубок в силу большой распространенности месторождений каолинита.

По своему химическому составу, $Al_2Si_2O_5(OH)_nH_2O$ ($n = 0, 2$), галлуазит близок к каолиниту, диккиту и накриту. Морфологию нанотрубки галлуазита можно рассматривать как свернутый в «рулон» слой каолина (толщина которого составляет 7 Å), см. рис. 1. Длина НТГ варьируется от 0.5 мкм до 1.2 мкм, а диаметр ≤ 100 нм. Внешняя и внутренняя поверхность слоя каолина образована соответственно из тетраэдров диоксида кремния и оксида алюминия. В гидрированном галлуазите между слоями каолина может содержаться слабосвязанный с поверхностями каолина слой из молекул воды толщиной 10 Å. Обезвоженные НТГ состоят из 15–20 слоев с периодом упаковки 0.72 нм с внутренней полостью диаметра ~15 нм [2].

Галлуазит используется как «готовый» наноконтейнер [2]. При введении в полимерные матрицы НТГ могут выполнять двойную функцию: повышать прочность материала за счет связывания с полимером и выделять в матрицу различные добавки, содержащиеся в их внутренней полости. Свойства поверхности нанотрубок галлуазита играют важную роль в формировании физических свойств полимерных нанокомпозитов. Из-за высокой поверхностной энергии НТГ легко формируют агломераты, что ухудшает прочность нанокомпозитов. Для улучшения степени диспергирования НТГ поверхность нанотрубок предварительно подвергается модификации (функционализации) с использованием катионных ПАВ, поликатионов (в силу отрицательного заряда поверхности НТГ) [2], органосиланов [4] и др. Также поверхность НТГ может быть модифицирована посредством прививки различных полимерных цепей, которые могут играть роль покрывающего или связующего агента. В первом случае роль модификатора – предотвращение агрегации наночастиц (НЧ), во втором случае модификатор используется для фиксации их в матрице, за счет вовлечения молекул модификатора в реакцию полимеризации. Для повышения степени диспергирования НЧ желательно использовать такие модификаторы, молекулы которых обладают высокой степенью совместимости с мономерами матрицы, в противном случае несовместимость модификатора и матрицы может также провоцировать фазовое разделение в системе [5; 6].

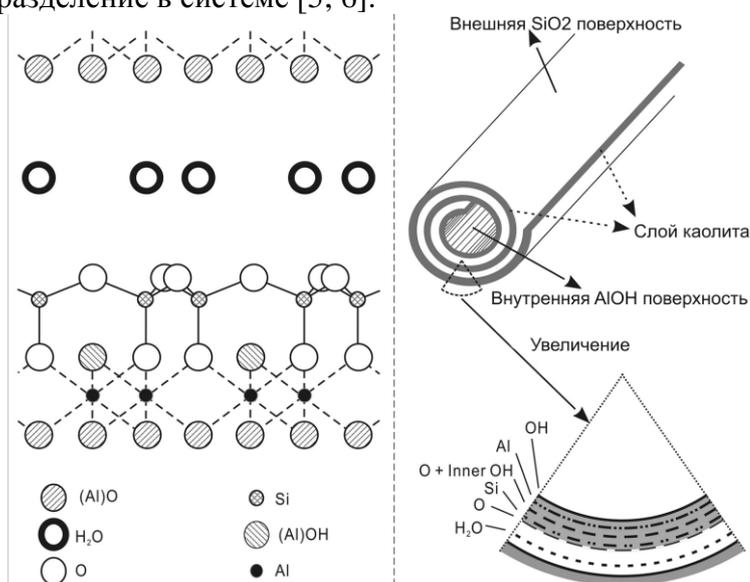


Рис. 1. Схематическое представление структуры слоев каолина и нанотрубок галлуазита. Толщина отдельного слоя составляет 7 Å, диаметр внутренней полости НТ – 15 нм (данный рисунок взят из [4])

Несмотря на большое количество работ, посвященных моделированию нанокompозитов, к настоящему времени в литературе отсутствуют работы по моделированию полимерных матриц, наполненных нанотрубками галлуазита. Отчасти это объясняется наличием в структуре материала атомов, для которых отсутствует параметризация в валентно-силовых полях (ВСП), используемых в методах атомистического моделирования. Кроме того, характерный размер НТ галлуазита (внешний диаметр ~ 100 нм, длина $\sim 0.5 - 1.2$ μm) не позволяет непосредственно задействовать такие объекты в прямом атомистическом моделировании, поскольку при использовании ячеек моделирования объема $\sim 1\mu\text{m}^3$ необходимо строить модели, содержащие порядка одного миллиарда атомов, что лежит далеко за пределами современных суперкомпьютеров. В таких случаях является целесообразным использование крупнозернистых моделей [7; 8], позволяющих проводить моделирование больших объемов вещества. В качестве вспомогательных методов моделирования для вычисления параметров взаимодействия крупнозернистых моделей могут быть задействованы и другие способы моделирования. Расчетные схемы, основанные на использовании нескольких методов, называются гибридными или многомасштабными методами моделирования [9– 11].

В работе было выполнено исследование поведения нанотрубок галлуазита в полимерном прекурсор, т.е. на ранней стадии получения нанокompозита, до проведения реакции полимеризации. В качестве прекурсора была рассмотрена смесь мономеров эпоксидной смолы 3,4-эпоксициклогексилметил-3,4-эпоксициклогексан-карбоксилата (EP) и отвердителя ангидрида 4-метилгексагидрофталевой кислоты (CA). Рассматривались нанотрубки галлуазита с модифицированной и немодифицированной поверхностью. В качестве поверхностного модификатора (ПМ) были рассмотрены молекулы ангидрида 3-(триэтоксисилил) пропилянтарной кислоты [12].

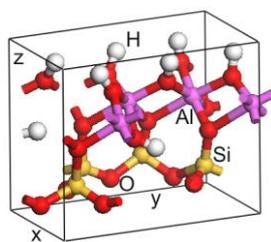


Рис. 2. Структура элементарной ячейки каолина

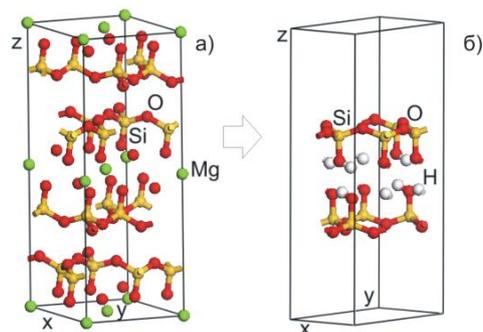


Рис. 3. Структура элементарной ячейки талька (а) и его упрощенного представления (б)

Для моделирования крупномасштабной структуры нанокompозита в огрубленном представлении был выбран метод диссипативной динамики частиц (ДДЧ) [13–15], в котором эволюция моделируемой системы описывается решением уравнений Ланжевена при наложенных дополнительных условиях на действующие силы. В настоящее время метод ДДЧ широко используется для моделирования различных полимерных наносистем [16–19]. В качестве программной реализации метода ДДЧ был использован усовершенствованный авторами программный код [20]. Расчет параметров взаимодействия крупнозернистых ДДЧ частиц модели был выполнен в рамках расширенной модели Флори–Хаггинса [21; 22]. Для проверки правильности полученной параметризации были выполнены расчеты по сравнению энергии адгезии ультратонких слоев смеси мономеров эпоксидной смолы и отвердителя на модифицированной и немодифицированной модели поверхности нанотрубок галлуазита с помощью метода атомистической молекулярной динамики. Для расчетов с использованием расширенной модели Флори–Хаггинса и атомистической молекулярной динамики было задействовано ВСР РСFF [23–26].

Очевидным способом упрощения галлуазита является использование вложенных нанотрубок, диаметры которых подобраны таким образом, чтобы моделировать периодичность чередования слоев каолина. Как уже отмечалось выше, нанотрубки галлуазита представляют собой свернутый в рулон слой каолина, структура которого показана на рис. 1, внешняя сторона которого состоит из диоксида кремния, а внутренняя из оксида алюминия. Хотя элементарная ячейка каолина (рис. 2) может служить основой построения нанотрубок и поверхностей галлуазита, наличие в них атомов алюминия и ионов кислорода делает невозможным вовлечение таких структур в проведение атомистического моделирования, поскольку популярные валентно-силовые поля (например, РСFF) не содержат необходимых силовых констант. Прямое моделирование таких структур может быть реализовано только с использованием в рамках квантово-механических методов [27].

Поскольку непосредственно с полимерной матрицей взаимодействуют только атомы диоксида кремния во внешнем слое, в качестве модели поверхности каолина можно использовать вещества, поверхность которых имеет структуру, подобную каолину. Таким требованиям отчасти удовлетворяет тальк, см. рис. 3а. Хотя все содержащиеся в этом материале атомы имеют параметризацию в РСFF, для упрощения моделирования мы удалили ионы магния, а атомы кислорода со свободными валентностями преобразовали в ОН группы.

Получившийся слой из двух поверхностей диоксида кремния с обращенными внутрь гидроксильными группами показан на рис. 3б, названный упрощенной моделью поверхности каолина (УМПК), может быть использован для построения моделей нанотрубок как галлуазита, так и внешних поверхностей каолина в задачах, когда важен учет лишь свойств внешней поверхности галлуазита.

Следуя задействованной методологии ДДЧ [17–19], огрубленная модель матрицы прекурсора с нанотрубками галлуазита была построена из одинаковых сферических частиц диаметра σ (единица длины) и массы m . Основные компоненты модели в атомистическом представлении и принципы их отображения на крупнозернистые ДДЧ частицы представлены на рис. 4. Общее количество подсистем модели равно 5, а именно С (фрагмент молекулы эпоксидной смолы), О (молекула отвердителя), Н (фрагмент гидроксированной поверхности диоксида кремния), S (фрагмент поверхности SiO₂) и P (фрагмент модифицированной поверхности SiO₂), см. рис. 4. Здесь и далее для обозначения ДДЧ частиц используются названия химических элементов. Необходимо отметить, что такое именование носит условный характер для облегчения процесса визуализации результатов моделирования посредством использования стандартных средств молекулярной графики.

В методе ДДЧ, консервативные силы межмолекулярного взаимодействия выражаются через параметры Флори–Хаггинса χ_{ij} [15–19], которые обеспечивают взаимосвязь между физико-химическими свойствами прототипа ДДЧ-частицы и особенностей их взаимодействия.

В качестве наименьшей частицы системы были выбраны мономеры отвердителя (частицы типа О). Мономеры эпоксидной смолы в крупнозернистом представлении представлены двумя частицами типа С, связанными ковалентной связью, деформация которой описывается законом Гука:

$$\mathbf{F}_{ij}^{Spr} = k |\mathbf{r}_{ij} - \sigma| \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \mathbf{F}'_{ij}^{Spr} = C |r_{ij} - \sigma| \hat{r}_{ij}, \quad (1)$$

где k – коэффициент жесткости, равный $4 k_B T / \sigma$ (k_B – константа Больцмана; T – абсолютная температура). Необходимо отметить, что в методе ДДЧ предполагается, что $\sigma = 1$, $m = 1$, $k_B T = 1$.

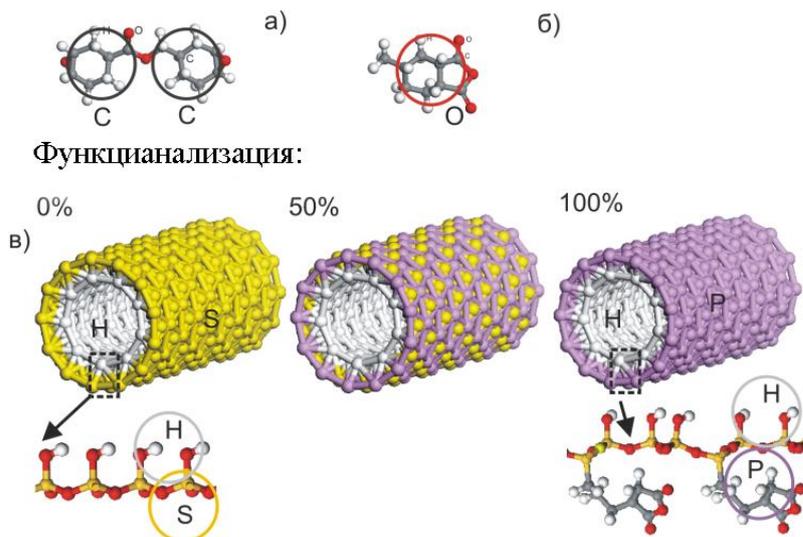


Рис. 4. Принципы отображения исходных атомистических структур на крупнозернистое представление ДДЧ модели: а – мономера эпоксидной смолы 3,4-эпоксициклогексилметил- 3,4- эпоксициклогексан-карбоксилата; б – отвердителя ангидрида 4-метилгексагидрофталевой кислоты и в – нанотрубок галлуазита с различной степенью функционализации поверхности ангидридом 3-(триэтоксисил) пропилянтарной кислоты

Крупнозернистая модель нанотрубки галлуазита была построена на основе двух вложенных нанотрубок, в качестве прототипа которых были использованы модели НТ углерода. Для придания модели галлуазита дополнительной жесткости между частицами, расположенными на расстоянии $\leq 2\sigma$, были введены дополнительные связи. Полученные структуры показаны на рис. 4в. Внутренняя поверхность нанотрубок была построена из частиц типа Н, а внешняя из S и Р. Частицы типа S соответствуют поверхности диоксида кремния, Р – привитым молекулам модификатора.

Для вычисления параметров взаимодействия крупнозернистых частиц a_{ij} необходимо рассчитать параметры Флори–Хаггинса. Для этих целей мы использовали расширенную теорию Флори–Хаггинса. В этом случае значение χ_{ij} (i, j – типы ДДЧ частиц) дается выражением:

$$\chi_{ij} = E_{\text{mix}}(ij)/RT \quad \chi_{ij} = \frac{E_{\text{mix}}(ij)}{RT}, \quad (2)$$

где, E_{mix} – энергия смешения; T абсолютная температура; R – газовая постоянная. Если $\chi \gg 1/2$, смешение компонент не является энергетически выгодным [28; 29]. E_{mix} соответствует изменению в свободной энергии системы смешанного и несмешанного состояний за счёт взаимодействия молекул подсистем. В классической теории

Флори–Хаггинса каждая единичная компонента системы занимает один узел решетки, в этом случае энергия смешивания определяется как

$$E_{\text{mix}}(ij) = \frac{1}{2}(Z_{ij}\langle E_{ij} \rangle_T + Z_{ji}\langle E_{ji} \rangle_T - Z_{ii}\langle E_{ii} \rangle_T - Z_{jj}\langle E_{jj} \rangle_T). \quad (3)$$

Здесь $\langle E_{ij} \rangle$ – усредненная энергия взаимодействия между компонентами i и j ; Z_{ij} – координационное число молекул j , которые могут быть размещены вокруг молекулы i . Расчет E_{mix} может быть реализован посредством генерирования молекулярных конфигураций методом Монте-Карло с последующим расчетом E_{ij} с использованием ВСП РСФФ и Z_{ij} с последующим усреднением по ансамблю при заданной температуре:

$$\langle E_{ij} \rangle_T = \int E_{ij} e^{-E/RT} dE / \int e^{-E/RT} dE. \quad (4)$$

Геометрия сгенерированной конфигурации для найденного Z_{ij} может быть оптимизирована также в рамках МК расчетной схемы посредством изменения взаимного расположения молекул и расчета энергии взаимодействия.

Для проведения расчетов χ_{ij} были построены следующие модели молекулярных систем: 1) 3,4-эпоксидциклогексилметил-3,4-эпоксидциклогексан-карбоксилата (EP), 2) 4-ангидрида метилгексагидрофталевой кислоты (CA), 3) наночастицы диоксида кремния диаметра 15 Å (НЧК), 4) наночастицы SiO₂ диаметра 15 Å с привитыми молекулами ангидрида 3-(триэтоксисилил) пропилянтарной кислоты (МНЧК), см. рис. 5а–е и 5) молекулы воды (H₂O) для моделирования взаимодействия внутренней гидроксильной поверхности нанотрубок с остальными компонентами системы. Главными параметрами выполненных расчетов было число сгенерированных конфигураций N и число МК шагов n , используемых для оптимизации геометрии сгенерированной конфигурации.

Расчет χ_{ij} параметров был выполнен с использованием ВСП РСФФ на основе 10,000–500,000 сгенерированных молекулярных конфигураций с последующей оптимизацией геометрии в течение 1,000 – 100,000 МК шагов. Полученные результаты собраны в табл. 1. Отрицательные значения χ_{ij} указывают на сильное сродство данных молекул друг к другу. В этом случае для вычисления a_{ij} принято полагать соответствующие значения χ_{ij} равными нулю [18; 30]. Исходя из этого, мы выбрали следующие значения χ собранные в табл. 2.

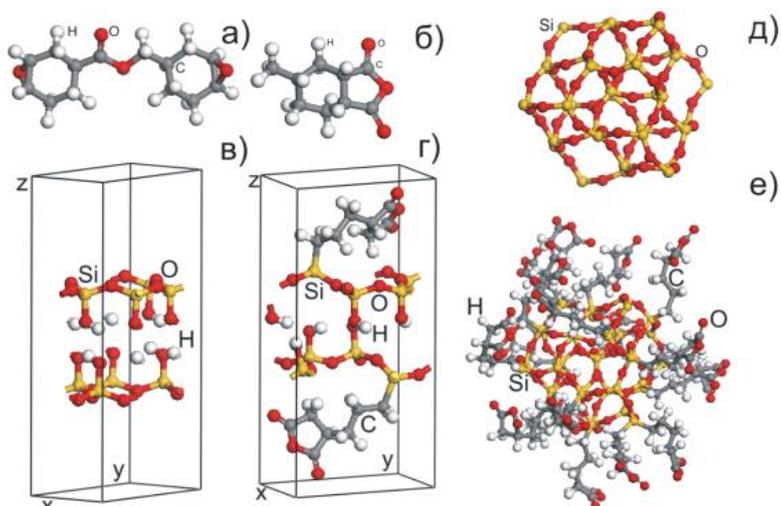


Рис. 5. Модели молекулярных систем для расчетов χ_{ij} : а – 3,4-эпоксидциклогексилметил-3,4-эпоксидциклогексан-карбоксилата; б – ангидрида 4-метилгексагидрофталевой кислоты; в – элементарная ячейка УМПК; г – элементарная ячейка УМПК с привитыми молекулами модификатора; д – наночастицы диоксида кремния диаметра 15 Å; е – наночастицы диоксида кремния диаметра 15 Å с привитыми молекулами ангидрида 3-(триэтоксисилил) пропилянтарной кислоты

Таблица 1

Значения χ_{ij} рассчитанные с использованием ВСП PCFF

	EP	CA	H ₂ O	НЧК	МНЧК
EP	0	-0.22 ± 0.37	1.48 ± 0.28	37.03 ± 9.08	-31.34 ± 15.54
CA	-	0	1.20 ± 0.24	45.54 ± 9.86	-9.29 ± 4.78
H ₂ O	-	-	0	87.27 ± 13.74	-13.16 ± 10.16
НЧК	-	-	-	0	-0.715 ± 1.0
МНЧК	-	-	-	-	0

Таблица 2

Выбранные значения χ_{ij} для моделирования в рамках ДДЧ

	C	O	S	P	H
C	0.0	0.0	37	0.0	1.5
O	-	0.0	45	0.0	1.2
S	-	-	0.0	0.0	87.3
P	-	-	-	0.0	0.0
H	-	-	-	-	0.0

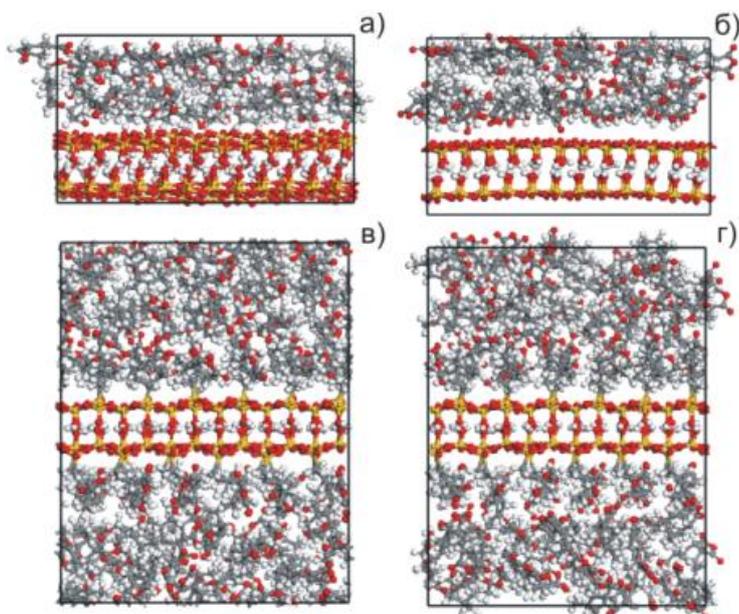


Рис. 6. Примеры атомистических моделей молекулярных систем для расчета плотности энергии адгезии: а – EP/ УМПК; б – СА/ УМПК; в – EP/МУМПК; г – СА/МУМПК

Для проверки полученных значений χ_{CS} , χ_{CP} , χ_{OS} , χ_{OP} были проведены дополнительные расчеты для усредненной плотности энергии адгезии E_{ij} между ультратонкими слоями, сформированными из мономеров эпоксидной матрицы и модифицированными/не модифицированными поверхностями УМПК. Расчет $\langle E_{ij} \rangle$ проводился по формуле:

$$\langle E_{ij} \rangle = \langle (E_{ij, total} - E_i - E_j) / 2S \rangle_{TP}, \quad (5)$$

где $E_{ij, total}$ – полная энергии системы; E_i и E_j энергия подсистем; S – площадь сечения ячейки моделирования. Построение и моделирование заданных наносистем в рамках атомистической молекулярной динамики (при нормальных условиях) выполнялись с использованием принципов, описанных в [5; 6; 31; 32]. Вычисление $\langle E_{ij} \rangle$ производилось с использованием продуктивной траектории длины 0.25 нс. Примеры моделей построенных молекулярных систем показаны на рис. 6. Результаты, собранные в табл. 3, свидетельствуют о том, что плотность энергии адгезии между полимерной матрицей и поверхностью нанотрубок галлуазита по абсолютной величине больше в случае модифицированных нанотрубок. Этот результат подтверждает факт, что модифицированные НТГ лучше совместимы с прекурсором полимерной матрицы.

Таблица 3

Вычисленные значения $\langle E_{ij} \rangle$	
Система	E_{ij} (ккал/моль)
EP/УМПК	-0.197
EP/МУМПК	-0.253
CA/УМПК	-0.202
CA/МУМПК	-0.292

Начальные состояния ДДЧ моделей смеси прекурсора матрицы эпоксидной смолы (до проведения реакции полимеризации) и алюмосиликатных нанотрубок генерировались посредством задания координат всех компонент системы случайным образом. Значения объемных долей мономеров СА и СА были выбраны равными 0.32 и 0.63, объемная доля нанотрубок была равна 0.05. Отношение мономеров EP2:CA2 = 1:2 соответствует стехимическому соотношению, при котором получается матрица с наибольшей плотностью [12; 33]. Размер ячейки моделирования был выбран равным $(24\sigma)^3$. Для тестирования постоейной ДДЧ модели были построены нанотрубки с общей долей функционализации поверхности 0%, 50% и 100%, см. рис. 4в. Рассматривалось два варианта начального распределения нанотрубок – упорядоченное (все нанотрубки ориентированы вдоль оси OX) и неупорядоченное (произвольная начальная ориентация), см. рис. 7. Выбранные параметры позволяют оценить влияние степени функционализации на конечные особенности распределения нанотрубок перед проведением реакции отвердевания эпоксидной смолы.

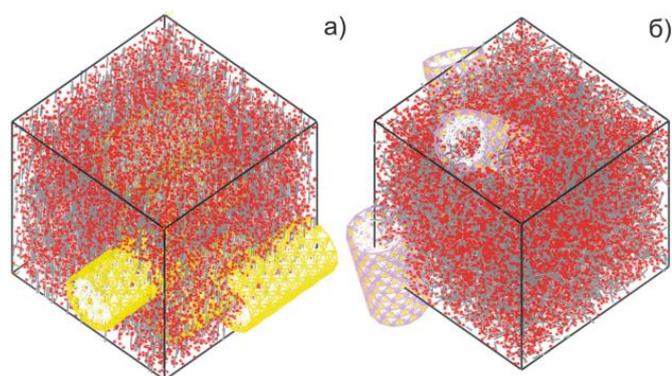


Рис. 7. Примеры начального упорядочения крупнозернистых моделей нанокompозитов: а – НТГ упорядоченные вдоль оси OX (модификация поверхности отсутствует); б – НТГ с неупорядоченным начальным распределением (модификация поверхности составляет 50%). Цветовая раскраска ДДЧ подсистем соответствует рис. 4

Моделирование подготовленных систем проводилось в течение 1,000,000 ДДЧ шагов. Примеры конечных состояний подсистемы НТГ

показаны на рис. 8. Как видно из рисунка, только при наибольшей степени функционализации поверхности нанотрубки галлуазита не агрегируют в конечном состоянии. Во всех случаях начальное распределение нанотрубок не оказывает существенного влияния на конечное состояние наносистемы.

Таким образом, в результате проведения данной работы была разработана крупнозернистая компьютерная модель, которая может быть использована для моделирования молекулярных систем, содержащих алюмосиликатные нанотрубки. В качестве тестовых расчетов была выполнена оценка влияния заданного начального распределения НТГ в прекурсор е эпоксидной матрицы (до проведения реакции полимеризации, что соответствует начальной стадии синтеза нанокompозита) и степени функционализации их поверхности на тенденцию алюмосиликатных нанотрубок к агрегации. Показано, что структура смеси мономеров эпоксидной смолы и нанотрубок (главным образом) определяется функционализацией поверхности НТ.

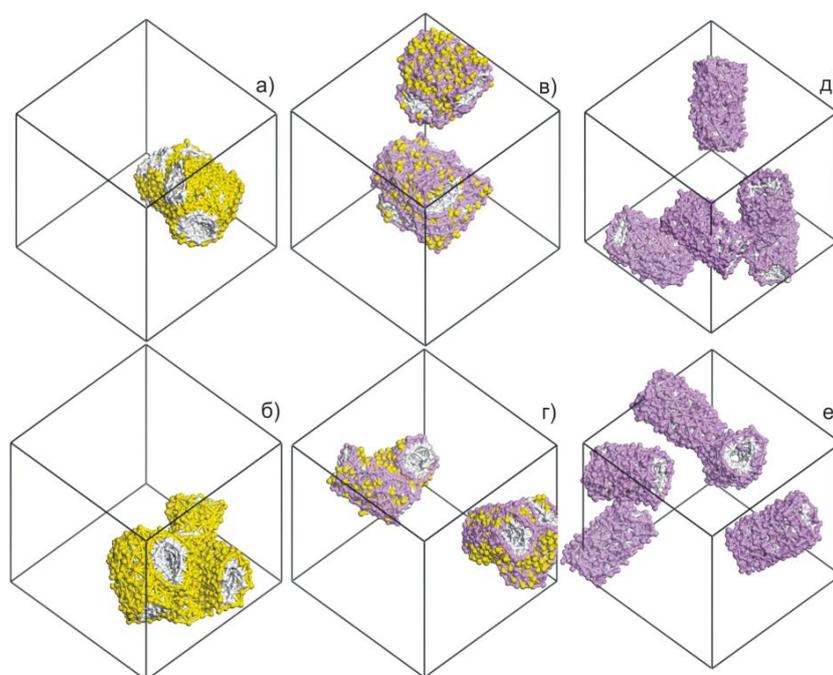


Рис. 8. Примеры мгновенных снимков подсистемы нанотрубок, внедренных в матрицу прекурсора. В системах а, в и д НТ имели упорядоченное начальное состояние (рис. 7а). В системах б, г и е НТ не имели начального упорядочения. В системах а и б НТ имели 0% функционализации (модифицированной поверхности); в и г 50%; д и е 100%. Для наглядности молекулы эпоксидной матрицы удалены из ячеек моделирования. Все системы получены по истечении 1,000,000 ДДЧ шагов

Полученные результаты свидетельствуют, что только для нанотрубок с максимальной степенью функционализации сохраняется их однородное распределение в пространстве. Данный вывод может быть учтен при экспериментальном получении нанокомпозитов с однородной структурой на основе полимеров и алюмосиликатных нанотрубок.

Полученная модель будет использована для изучения полимерных прекурсоров и нанокомпозитов с внедренными алюмосиликатными нанотрубками. Следует отметить, что построенная модель может применяться и для построения нанокомпозитов с полимерными матрицами, имеющих различную степень сшивки. При этом наночастицы (за счет модификации поверхности) также могут образовывать межмолекулярные связи с мономерами матрицы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (уникальный идентификатор соглашения RFMEFI61314X0027, номер соглашения 14.613.21.0027). Авторы также выражают благодарность проф. О.Е. Филиповой, с.н.с Барабановой А.И. за полезные обсуждения и СКЦ МГУ за предоставление вычислительных ресурсов суперкомпьютера «Ломоносов» [34].

Список литературы

1. Kamble R., Ghag M., Gaikawad S., Panda B.K. // J. Adv. Scient. Res. 2012. V.3, № 2. P. 25.
2. Lvov Y., Abdullayev E. // Progress in Polymer Science. 2013. V. 38. P. 1690.
3. Joussein E., Petit S., Churchman J., Theng B., Righi D., B. Delvaux // Clay Minerals. 2005. V. 40. P. 383.
4. Yuan P., Southon P.D., Liu Z., Green M.E.R., Hook J.M., Antill S.J., Kepert C.J. // J. Phys. Chem. C. 2008. V. 112. P. 15742.
5. Комаров P.V., Mikhailov I.V., Chiu Y.-T., Chen S.-M., Khalatur P.G. // Macromolecular Theory and Simulations. 2013. V. 22, № 3, P. 187.
6. Комаров П.В., Михайлов И.В., Чиу Ю.-Т., Чен Ш.-М. // Российские нанотехнологии. 2012. Т. 7, № 1–2. P. 57.
7. Muller-Plathe F. // Soft materials. 2003. V.1, № 1. P. 1.
8. Glotzer S.C., Paul W. // Annual Review of materials research. 2002. V. 32. P. 401.
9. Зубков В.В., Комаров П.В. // Журн. физ. химии. 2012. Т. 86, № 7. С. 1226.
10. Zubkov V.V., Komarov P.V. // J. Chem. Phys. 2012. V. 137, № 7. P. 074705.
11. Комаров П.В. Использование многомасштабного моделирования для изучения свойств нанодисперсных полимерных систем: монография. Тверь: Твер. гос. ун-т, 2014. 256 с.

12. Barabanova A.I., Shevnin P.L., Pryakhina T.A., Bychko K.A., Kazantseva V.V., Zavin B.G., Vygodskii Ya.S., Askadskii A.A., Philippova O.E., Khokhlov A.R. // *Polymer science A*. 2008. V. 50, № 7. P. 808.
13. Hoogerbrugge P.J., Koelman J. // *Europhys. Lett*. 1992. V.19, № 3. P. 155.
14. Koelman J., Hoogerbrugge P.J. // *Europhys. Lett*. 1993. V. 21, № 3. P. 363.
15. Groot R.D., Warren P.B. // *Journal of chemical physics*. 1997. V.107, № 11. P. 4423.
16. Espanol P., Warren P. // *Europhys. Lett*. 1995. V. 30. P. 191.
17. Комаров П.В., Веселов И.Н., Халатур П.Г. // *Российские нанотехнологии*. 2014. Т. 9, № 9–10. P.38.
18. Бабуркин П.О., Комаров П.В., Хижняк С.Д., Пахомов П.М. // *Коллоидный журнал*. 2015. Т.77, № 5. С.572.
19. Комаров П.В., Халатур П.Г., Хохлов А.Р. // *Доклады академии наук*. 2015. Т. 464, № 3, С. 305.
20. http://polymer.physik.uni-lm.de/~khalatur/exchange/DPD_Chem/team.htm
21. Blanco M.J. // *Comput. Chem*. 1991. V. 12. P. 237.
22. Fan C.F., Olafson B.D., Blanco M., Hsu S.L. // *Macromolecules*. 1992. V. 25. P. 3667.
23. Sun H. // *Macromolecules*. 1995. V. 28. P. 701.
24. Sun H., Mumby S.J., Maple J.R., Hagler A.T. // *J. Am. Chem. Soc*. 1994. V. 116. P. 2978.
25. Sun H. // *J. Comput. Chem*. 1994. V. 15. P. 752.
26. Sun H. // *Macromolecules*. 1995. V. 28. P. 701.
27. Guimarães L., Enyashin A.N., Seifert G., Duarte H.A. // *J. Phys. Chem. C*. 2010. V. 114. P. 11358.
28. Bates F.S. // *Annu. Rev. Phys. Chem*. 1990. V.41. P.525.
29. Hansen Solubility Parameters: A User's Handbook, 2nd Ed., C.M. Hansen, CRC Press, Boca Raton, FL, 2007
30. Auer A.A., Richter A., Berezkin A.V., Guseva D.V., Spange S. // *Macromol. Theory Simul*. 2012. V. 21. № 9. P. 615.
31. П.В. Комаров, Ю.-Т. Чиу, Ш.-М. Чен, Л.В. Жеренкова, Ю.Н. Коваленко // *Российские нанотехнологии*. 2010. Т. 5. № 5–6. С. 45.
32. Pavel V. Komarov, Yu-Tsung Chiu, Shih-Ming Chen, Peter Reineker // *Macromolecular Theory and Simulations*. 2010. V. 19, № 1. P. 64.
33. Pavel V. Komarov, Chiu Yu-Tsung, Chen Shih-Ming, Pavel G. Khalatur, Peter Reineker // *Macromolecules*. 2007. V. 40, № 22. P. 8104.
34. Воеводин В.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. *Практика суперкомпьютера "Ломоносов" // Открытые системы. - Москва: Издательский дом "Открытые системы", 2012. 7*

THE DEVELOPMENT OF A HYBRID MODEL FOR THE SIMULATION OF COMPOSITES BASED ON POLYMERS AND ALUMINOSILICATE HALLOYSITE NANOTUBES

P.V. Komarov^{1,2} and V.A. Ivanov³

¹ Tver State University

² INEOS RAS, Moscow

³ Moscow State University

The problems of constructing of large-scale model of composites based on polymers and aluminosilicate nanotubes in order to predict the spatial distribution of the filler in the early stages of material formation have been considered. To carry out test simulations, mixture of 3,4-epoxycyclohexylmethyl- 3,4-epoxycyclohexanecarboxylate as resin monomers and 4-methylhexahydrophthalic anhydride as curing agents has been used.

Keywords: nanocomposites, nanoparticles, computer simulations

Об авторах:

КОМАРОВ Павел Вячеславович – доктор физико-математических наук лаборатории физической химии полимеров ИНЭОС РАН, доцент кафедры общей физики Тверского государственного университета, e-mail: pvkomarov@gmail.com

ИВАНОВ Виктор Александрович – доктор физико-математических наук, доцент кафедры физики полимеров и кристаллов Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, e-mail: ivanov@polly.phys.msu.ru