

Структура и расчет составов дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов в массовых и объемных единицах

Structure and calculation of filler content in particle-filled polymer composites in mass and volume units

И.Д. СИМОНОВ-ЕМЕЛЬЯНОВ

I.D. SIMONOV-EMEL'YANOV

«МИРЭА – Российский технологический университет» (Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова)

MIREA – Russian Technological University (Lomonosov Institute of Fine Chemical Technologies)

simonov@mitht.ru

В работе приведены данные расчетов по структуре и составам дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов (ДНПКМ) с различными наполнителями и полимерными матрицами.

Показано, что параметры структуры, составы ДНПКМ, а также зависимости свойства – параметры структуры следует представлять только в объемных единицах (об.д. или об.%).

Расчеты составов в массовых единицах допускаются для расчетов навесок при создании ДНПКМ.

Ключевые слова: полимеры, наполнители, композиционные материалы, структура и составы дисперсных систем

The paper presents the data of calculations of the structure and composition of particle-filled polymer composites with various fillers and polymer matrices. It is shown that the parameters of the structure, the filler content of composite, as well as the dependencies of properties on the parameters of the structure should be presented only in volume units (vol. fractions or vol. %). Calculations of the compositions in mass units are allowed for the calculation of weighing in composites manufacturing.

Keywords: polymers, fillers, composite materials, structure and composition of dispersed systems

DOI: 10.35164/0554-2901-2019-5-6-9-10

При создании дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов (ДНПКМ) расчеты их составов и определение содержания исходных компонентов можно выполнять как в массовых, так и объемных единицах [1].

Технологам при производстве ДНПКМ непосредственно на заводах, в цехах удобно проводить расчеты в массовых единицах (массовых долях или процентах) и получать навески исходных компонентов. Массовые единицы указывают на соотношение в ДНПКМ и навесках исходных компонентов и не имеют отношения к структуре и ее параметрам.

При рассмотрении в научных журналах и статьях вопросов структурообразования, параметров структуры и зависимостей свойств от состава ДНПКМ следует использовать описание составов в объемных единицах (объемных долях или процентах).

Анализ научно-технической литературы показал, что авторы многочисленных статей, рассуждая о структуре и свойствах ДНПКМ, приводят данные и зависимости чаще всего в массовых, а не объемных единицах.

Тезис для всего материаловедения, что структура определяет свойства, остается верным. Структура композиционных материалов (и в частности ДНПКМ) описывается только в объемных единицах и не может быть представлена в массовых единицах, так как в этом случае следует учитывать соотношение плотностей исходных компонентов [2, 3].

Это можно проиллюстрировать на простом примере, который показывает, что при одной и той же структуре и составе в объемных единицах, состав материала в массовых единицах может изменяться от 0,001 до 96 массовых долей.

Возьмем объем куба со стороной $2d$ и в него поместим 8 шаров (простая кубическая упаковка) с диаметром d , при этом шары займут объем равный 0,52 об.д. (58 об.%). Структуру такого ДНПКМ в объемных единицах можно представить как: 0,52 об.д. занимает дисперсный наполнитель и 0,48 об.д. – полимерное связующее.

Рассмотрим состав этой модельной структуры в массовых единицах при условии, что шары изготовлены из материалов с разной плотностью (ρ_n), а плотность полимерной матрицы (ρ_p) примем равной $\sim 1,0 \text{ г/см}^3$.

Расчеты были выполнены для шаров с плотностью от 0,00129 до $21,0 \text{ г/см}^3$. Этот диапазон по плотности охватывает все известные наполнители для полимерных материалов: от газообразных (воздух) до самого тяжелого металла (платины).

Ниже приведены истинные плотности материалов, которые использовали для изготовления шаров: воздух – $0,00129 \text{ г/см}^3$, пенополистирол – 0,1, пористый материал – 0,25, древесина – 0,5, полимерный материал – 1,25, стекло – 2,5, титан – 4,4, сталь – 7,8, свинец – 16,0 и платина – $21,0 \text{ г/см}^3$.

На рис. 1 в качестве примера приведена зависимость доли дисперсного наполнителя (шар) в ДНПКМ в массовых единицах от плотности исходного компонента при условии, что сохраняется постоянная объемная доля наполнителя, которая составляет 0,52 об.д.

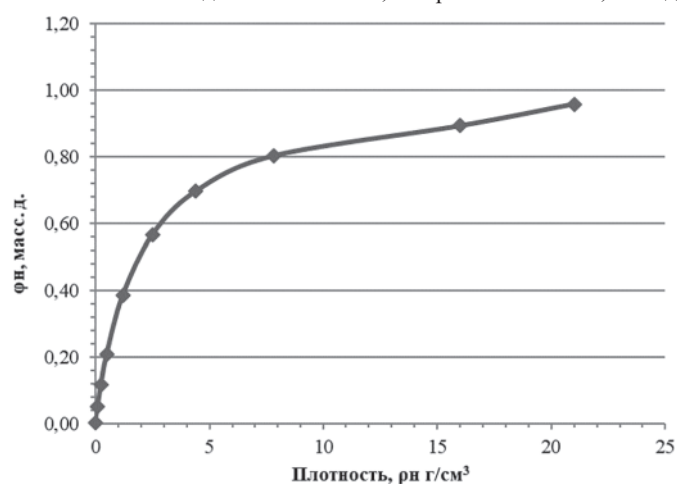


Рис. 1. Зависимость массовой доли дисперсного наполнителя (ϕ_n) в ДНПКМ с плотностью полимерной матрицы $1,0 \text{ г/см}^3$ при постоянной объемной доле дисперсного наполнителя – 0,52 об.д.

Таким образом, структура ДНПКМ остается постоянной и не зависит от плотности исходного компонента (шара).

Приведенные данные показывают, что при постоянных параметрах структуры ($\phi_n = 0,52 \text{ об.д.}$) ДНПКМ его состав, выраженный

в массовых единицах (масс.д.), определяется значением истинной плотности наполнителя (при постоянной плотности полимерной матрицы) и изменяется от 0,0007 до 0,96 масс.д. Поэтому проводить сравнение результатов для дисперсных систем с наполнителями с разной плотностью на одной или разных полимерных матрицах некорректно.

На этом примере убедительно показано, что параметры структуры ДНПКМ описываются только в объемных единицах (об.д. или об.%) и не зависят от плотности дисперсного наполнителя и полимерной матрицы, что позволяет сравнивать результаты для наполненных систем с разными наполнителями и матрицами.

Можно провести аналогичные расчеты для ДНПКМ с полимерными матрицами разной плотности ($\rho_{\text{п}}$ от 0,80 до 1,5 г/см³) и для фторопласта с плотностью 2,2 г/см³, значения которой охватывают весь диапазон плотностей для полимеров (рис. 2), а также для дисперсного наполнителя при разных значениях его объемной доли, согласно классификации дисперсных систем [4]: разбавленные системы – 0,076 об.д., низконаполненные – 0,16 об.д., средненаполненные: для СНС-1 – 0,255 об.д. и СНС-2 – 0,34 об.д., высоконаполненные – 0,52 и 0,64 об.д.

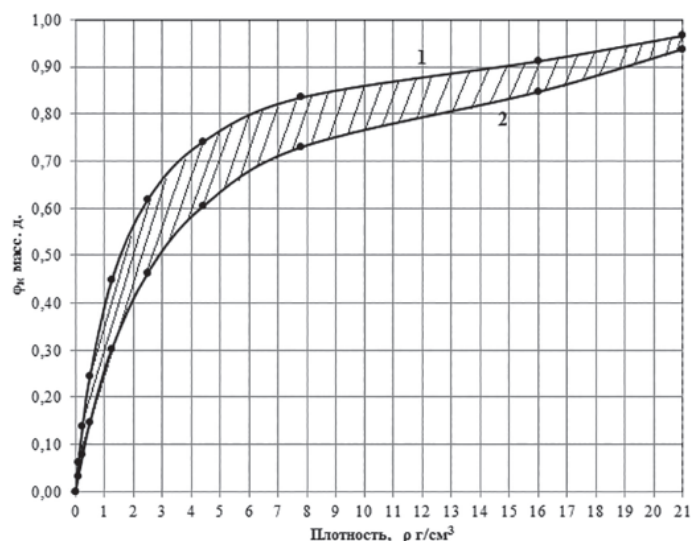


Рис. 2. Зависимость массовой доли дисперсного наполнителя (ϕ_n) в ДНПКМ с плотностью полимерной матрицы 0,8 г/см³ (1) и 1,5 г/см³ (2) при постоянной объемной доле дисперсного наполнителя – 0,52 об.д.

Проектировать составы ДНПКМ с комплексом заданных свойств следует только в объемных единицах (об. д. или об.%), как показано в таблице в работах [4, 5].

Содержание дисперсного наполнителя выбирают согласно классификации дисперсных систем по структурному принципу [4], значениям параметров решеток (координационное число и коэффициент плотности упаковки) и обобщенного параметра структуры Θ (доля полимерной матрицы для формирования прослойки между дисперсными частицами).

Когда определена группа ДНПКМ (разбавленные, низконаполненные, средненаполненные до предела текучести и с пределом текучести, высоконаполненные и сверхвысоконаполненные), обобщенный параметр структуры Θ и содержание наполнителя в объемных единицах, то для конкретной полимерной матрицы с заданной плотностью ($\rho_{\text{п}}$) содержание дисперсного наполнителя пересчитывают с объемных на массовые единицы.

Связь между объемными и массовыми единицами содержания наполнителя ($\phi_{\text{об.н}}$ и $\phi_{\text{масс.н}}$) в двухфазном ДНПКМ (наполнитель + полимерная матрица) определяется соотношениями:

$$\phi_{\text{об.н}} = (\rho_{\text{п}} / \rho_{\text{н}}) / [(1 / \phi_{\text{масс.н}}) + (\rho_{\text{п}} / \rho_{\text{н}}) - 1], \text{ об.д.}$$

$$\phi_{\text{масс.н}} = \phi_{\text{об.н}} / [\phi_{\text{об.н}} (1 - \rho_{\text{п}} / \rho_{\text{н}}) + \rho_{\text{п}} / \rho_{\text{н}}], \text{ масс.д.}$$

После этого технологи рассчитывают навески для получения заданного количества полимерного композиционного материала.

Полученные результаты позволяют сделать только один вывод: проектировать структуру, составы ДНПКМ, а также рассматривать зависимости свойство – параметры структуры следует только в объемных единицах.

Данные о свойствах ДНПКМ, представляемые в массовых единицах, верны только для конкретной полимерной матрицы и дисперсного наполнителя, не связаны со структурой композиционного материала и не позволяют проводить их сравнение с другими дисперсными системами.

Литература

1. Симонов-Емельянов И.Д., Кандырин Л.Б. / Сборник аналитических и проблемных задач по курсу «Принципы создания композиционных материалов» // – М.: МИХМ, 1999. – 85 с.
2. Симонов-Емельянов И.Д., Апекусов Н.В., Зарубина А.Ю., Зубков С.Б. / «Обобщенные параметры структуры, составы и свойства дисперсно-наполненных полимерных композиционных материалов со стеклянными шариками» // Пластические массы. – 2012, № 5, С. 52–57.
3. Симонов-Емельянов И. Д., Апекусов Н.В., Трофимов А.Н., Золкина И.Ю., Андреева Т.И., Петров О.О. / Структурообразование, составы, и свойства дисперсно-наполненных полимерных нанокомпозитов» // Пластические массы. – 2012 – №6, С. 7–13.
4. Симонов-Емельянов И.Д. / Построение структур в дисперсно-наполненных полимерах и свойства композиционных материалов // Пластические массы. 2015, №9–10, С. 29–36.
5. Полимерные композиционные материалы. Состав. Структура. Свойства. Под ред. акад. А.А. Берлина, гл. 7 «Технология получения дисперсно-наполненных пластических масс» / И.Д. Симонов-Емельянов. – С-Пб.: Профессия, 2009. – 314–354 с.