

ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА КАРБОНИЗАЦИИ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

Сапожникова Т.С.

Южно-Уральский Государственный Университет,
Физический ф-т, каф. Общей и теоретической физики,
Россия, 454080, г. Челябинск, пр-т Ленина 76, корп. 1, ауд. 249,
Тел.: (8351) 265-47-13, E-mail: lyagushkina@rambler.ru

Поливинилиденфторид (ПВДФ) – полимер, который нашел широкое применение в промышленности благодаря ряду своих свойств (высокой прочности, эластичности, химической инертности, термостойкости и др.), а также перспективный материал для электроники и медицины. При этом интерес представляет не только сам полимер, но и продукты его карбонизации, или дегидрофторирования.

Известно, что под воздействием рентгеновского излучения, химических реагентов или при бомбардировке заряженными частицами происходит дегидрофторирование полимера: с его поверхности удаляются атомы фтора и водорода. Данный процесс также называется карбонизацией, поскольку при модификации полимера не удаляется углерод, и образуются углеродные цепочечные структуры (карбиноиды).

Следует отметить, что экспериментальные исследования карбонизации ПВДФ не дают детального представления о ходе данного процесса, поэтому для более глубокого рассмотрения необходимым оказалось проведение компьютерного моделирования.

Согласно математической модели карбонизации ПВДФ [1] нами была разработана методика моделирования процесса карбонизации. Затем методами квантово-химических расчетов [2] проведено компьютерное моделирование геометрической и электронной структуры молекул ПВДФ, карбина и промежуточных структур, образующихся в ходе карбонизации (согласно методике). По результатам расчетов строились полные и парциальные плотности состояний рассматриваемых молекул и сравнивались с экспериментальными данными – фотоэлектронными и NEXAFS спектрами пленки ПВДФ, снятыми по мере карбонизации.

Таким образом, была установлена возможность интерпретации образующихся в ходе карбонизации структур по фотоэлектронным и NEXAFS спектрам, а также адекватность и применимость разработанной методики для исследования процесса дегидрофторирования ПВДФ.

Литература.

1. *Voinkova I.V., Ginchitskii N.N. et al.* A model of radiation-induced degradation of the poly(vinylidene fluoride) surface during XPS measurements // *Polymer Degradation and Stability*. **V. 89**, № 3, 2005. P. 471-477.
2. *Shmidt M.W., Baldrige K.K. et al.* General atomic and molecular electronic structure system // *J. Comp. Chem.* **V. 14**, №11, 1993. P. 1347-1363.