

С. А. Зайцев, асп.; С. Г. Тихомиров, проф., д-р техн. наук;
 М. А. Кулигина, асп.; М. Н. Холобаев, асп.
 (ФГБОУ ВО «ВГУИТ», г. Воронеж, Российская Федерация)

АСПЕКТЫ ИМИТАЦИОННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ РАДИОЛИЗА ЭЛАСТОМЕРОВ

В настоящее время производство различных материалов путем радиационно-химической обработки позволяет минимизировать издержки производства и вред окружающей среде. В связи с высокой производительностью и низкими энергетическими затратами в последнее время большое значение приобретают процессы переработки и регенерации эластомеров под действием радиации [1]. Высокая стоимость бутилкаучука определяет целесообразность его регенерации из отработанных изделий. Источником получения регенерата являются, в том числе, отработанные диафрагменные камеры шинных заводов [2]. Для того, чтобы производить регенерат требуемого качества, необходимо тщательно контролировать все параметры технологического процесса. Исходя из этого создание цифрового двойника является целесообразным для интенсификации производства бутилрегенерата.

Первым этапом моделирования процесса является построение пространственной структуры эластомера, ранее описанное авторами в работах [3–5]. В реальных условиях начальная информация о молекулярно-массовом распределении исходного материала и его моментах получается при помощи методов гелепроникающей хроматографии (ГПХ). Но не все современные хроматографы могут предоставить исчерпывающие аналитические данные по распределению длин макромолекул. Однако, оценки величины среднечисловой (1) и среднемассовой (2) молекулярной массы зачастую бывает достаточно для достижения требуемой точности модели пространственной структуры эластомеров.

$$\overline{M}_n = \frac{n_1 M_1 + n_2 M_2 + n_3 M_3 + \dots}{n_1 + n_2 + n_3 + \dots} = \frac{\sum n_i M_i}{\sum n_i} \quad (1)$$

где n_i – число макромолекул с молекулярной массой M_i

$$\overline{M}_w = \frac{n_1 M_1^2}{\sum n_i M_i} + \frac{n_2 M_2^2}{\sum n_i M_i} + \frac{n_3 M_3^2}{\sum n_i M_i} + \dots = \frac{\sum n_i M_i^2}{\sum n_i M_i} \quad (2)$$

Важным дополнением для повышения точности модели является добавление в нее объектов, имитирующих специальные добавки,

формирующие свойства конкретного продукта, в том числе технический углерод (техуглерод). Частицы технического углерода представляют собой глобулы, состоящие из деградированных графитовых структур.

Учет техуглерода в пространственной модели проводится следующим образом: при известном объемном соотношении эластомера и техуглерода генерируются сферы, имитирующие глобулы последнего. Размеры глобул генерируются случайным образом, при этом их общий объем строго соответствует заданной объемной доле. Сферы помещаются случайным образом в область моделирования, представляющую собой жестко ограниченный фрагмент трехмерного евклидова пространства заданной формы. Глобулы тоже являются ограничениями, внутри них элементы структуры эластомера находиться не могут. Затем в данной области, исходя из заданных моментов молекулярно-массового распределения, как совокупность точек строится молекулярный ансамбль, каждая из точек представляет собой значимый структурный элемент вещества - мономер. Точки, объединенные между собой первичными связями (продольными), являются макромолекулами. Ансамбль макромолекул строится последовательно, с учетом минимума потенциальной энергии. Построение модели завершается включением в описание процесса образования поперечных (вторичных) химических связей между мономерами, которые отражают процесс вулканизации. Для этого выявляются все возможные пары элементов макромолекулы, которые могут потенциально образовать новую связь в зависимости от критерия расстояния между ними. Таким образом, получена модель эластомера, соответствующая агрегатному состоянию, внутреннему строению и молекулярно-массовому распределению полимера.

Радиация, как неизбежный, высокоэффективный инструмент ионизации, может образовывать ионы и свободные радикалы практически во всех материалах. При воздействии излучения высокой энергии в полимерах происходят глубокие структурные и химические изменения: разрыв поперечных связей, деструкция химических связей между мономерами. Как правило, процессы синтеза и деструкции в облучаемом материале протекают одновременно и являются независимыми друг от друга. Ограничиваясь только процессами деструкции, в модели учтены два присущих данному процессу физических явления. Во-первых, рассеяние частиц излучения на ядрах атомов облучаемого вещества. Во-вторых, потери энергии на ионизацию и разрыв химических связей. Если частица излучения исчерпала свой ионизационный потенциал, она исключается из модели. В рамках исследова-

ния учтено такое свойство техуглерода, как поглощение частиц ионизирующего излучения, например, электронов, что явным образом влияет на деструкцию химических связей - если частица в своей траектории движения пересекает глобулу техуглерода, то с заданной вероятностью она исключается из модели.

На всех этапах моделирования процесса при помощи численных методов перколяции осуществляется оценка таких параметров модели как: молекулярно-массовое распределение, количество и концентрация химических связей различного типа, энергия, потраченная на расщепление химических связей.

Данная работа является частью исследования, направленного на создание автоматизированной системы управления процессом производства бутилрегенерата, обеспечивающей возможность предсказания эксплуатационных характеристик конечного продукта в зависимости от поглощенной дозы. Это позволит использовать отходы производства резинотехнических изделий для повторного применения в производстве шин, кровельных материалов и дорожных покрытий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zaharescu T., Cazac C., Jipa S. Assessment on radiochemical recycling of butyl rubber // Nucl. Meth. in Phys. Res. B. – 2001. – Vol. 185. – P. 360–364.

2. Вагизова Р. Р., Хакимуллин Ю. Н., Степанов П. А., Палютин Ф. М. Некоторые особенности вулканизации радиационного регенерата бутилкаучука // Вестник Казанского технологического университета. – 2006. – № 2. – С. 12–15.

3. Zaitsev S., Tikhomirov S., Semenov M., Karmanova O., Kuligina M., Meleshenko P. Aspects of Modeling Radiolysis in Polymer Structures // 3rd International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA), 2021. – P. 51–55.

4. Zaitsev S. A., Semenov M. E., Meleshenko P. A., Tikhomirov S. G., Chernyaev A. P. Digital model of polymer molecules // J. Phys.: Conf. Ser., 2021. – P. 1745–1748.

5. Mathematical modeling of the thermomechanical destruction process of elastomers treated with ionizing radiation / A. K. Pogodaev, S. G. Tikhomirov, O. V. Karmanova // Journal of Chemical Technology and Metallurgy, 2019. – Vol. 54, No. 5. – P. 902–908.