

Aljabri M. D., Rahman M. M. Rheological and mechanical study of micro-nano sized biocarbon-PLA biodegradable biocomposites // *BioResources*. – 2023. – № 18(3) – P. 4492–4509.

3. Zouari M., Devallance D. B., Marrot L. Effect of Biochar Addition on Mechanical Properties Thermal Stability, and Water Resistance of Hemp-Polylactic Acid (PLA) Composites // *Materials*. – 2022. – № 15(6). – P. 2271.

УДК 678.7-139.9:678.742.3

А. И. Нигматуллина, доц., канд. техн. наук;  
С. И. Вольфсон, зав. кафедрой ХТПЭ, д-р техн. наук;  
Ю. М. Казаков, ректор, д-р техн. наук  
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»), г. Казань, Российская Федерация)

### **МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ДРЕВЕСНО-ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТАХ**

В последние годы получение полимерных композиционных материалов производится на основе различных полимеров и их смесей, наполнителей и процессинговых добавок. Для исследователя, разрабатывающего новые составы, важной и актуальной является задача прогнозирования механической прочности получаемого композиционного материала. Это становится возможным при использовании энергии когезии атомных групп полимеров, которая позволяет существенно уменьшить количество трудоемких экспериментов и осуществить целенаправленный подбор полимеров. Макромолекулы полимеров связаны между собой силами молекулярного взаимодействия, от которых зависят механические свойства полимеров. Установлено, что полимеры с высокой когезионной энергией дают более прочные полимерные композиционные материалы.

Таким образом, прочностные свойства древесно-полимерных композитов (ДПК) во многом определяются когезией – сцеплением молекул полимеров, входящих в состав ДПК, под действием сил межмолекулярного взаимодействия [1]. Межмолекулярное взаимодействие в ДПК обусловлено слабыми Ван-дер-Ваальсовыми силами (до 40 кДж/моль), которые состоят из дисперсионного (до 40 кДж/моль) взаимодействия и водородной связи (до 50 кДж/моль). Межмолекулярное взаимодействие зависит от атомных групп, строения и количества группировок мономерного звена данного полимера [2]. Когезионная прочность полимера определяется числом и величиной этих связей. Зная химическое строение полимера, можно рассчитать величину когезии данного полимера.

В огромном большинстве ДПК матрицей служит полиэтилен

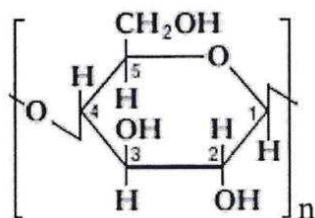
(ПЭ). По объему применения полимеры располагаются в следующий ряд: ПЭ > (поливинилхлорид) ПВХ > (полипропилен) ПП. Наполнителем ДПК в основном является древесная мука в количестве 50–80% [3]. Согласно данным [4] в таблице 1 приведены расчетные значения когезии для различных групп полимеров, которые используются в производстве ДПК.

За формулу повторяющегося звена древесной муки принимается структура целлюлозы, которая является основным компонентом данного наполнителя.

**Таблица 1 – Когезионные характеристики полимеров**

Полимер	Структурная формула	Группы, ответственные за когезию	Количество групп	Общая когезия, кДж/моль
Полиэтилен (ПЭ)	$(-\text{CH}_2-\text{CH}_2-)_n$	$-\text{CH}_2-$	2	5,6
Полипропилен (ПП)	$(-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{CH}_3)-)_n$	$-\text{CH}_2-$ $-\text{CH}-$ $-\text{CH}_3$	1 1 1	11,53
Поливинилхлорид (ПВХ)	$(-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{Cl})-)_n$	$-\text{CH}_2-$ $-\text{CH}-$ $-\text{Cl}$	1 1 1	16,1
Древесная мука (наполнитель)	$(-\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5-)_n$	$-\text{CH}-$ $-\text{O}-$ $-\text{OH}$ $-\text{CH}_2-$	5 2 3 1	94,6

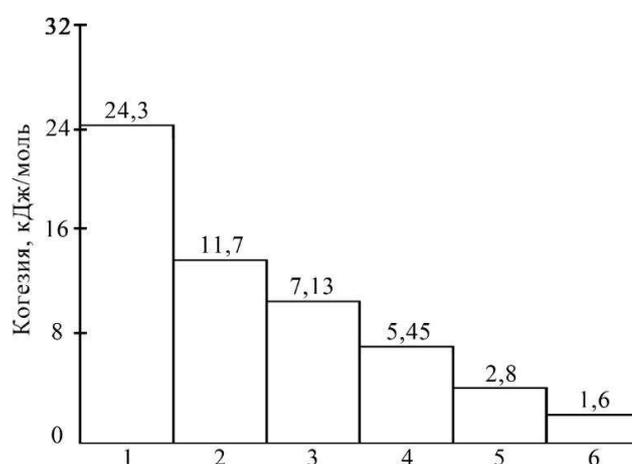
Развернутая структурная формула целлюлозы имеет следующий вид [2]:



В работе [5], полярность ПЭ, ПП, ПВХ и древесной муки составляет 0, 0,03, 0,27 и 0,61 соответственно. ПЭ и ПП относятся к неполярным полимерам. Причем, с увеличением полярности происходит повышение его поверхностной энергии [6-10]. По возрастанию полярности и поверхностной энергии полимеры располагаются в следующий ряд: ПЭ < ПП < ПВХ < целлюлоза.

Данные таблицы 1 показывают, что полярная гидрофильная группа (ОН) дает высокое значение межмолекулярного притяжения, тогда как неполярные гидрофобные группы ( $-\text{CH}-$ ,  $-\text{CH}_2-$ ,  $-\text{CH}_3$ ) малую

молекулярную когезию. Когезия ПЭ, ПП и ПВХ, молекулы которых имеют в цепи  $-CH_2-$  группу с молекулярной когезией, равной 2,8 кДж/моль;  $-CH-$ ,  $-CH_3$ ,  $-Cl$  группы по 5,69 кДж/моль и  $11,53 \div 16,1$  кДж/моль в десятки раз меньше когезии целлюлозы, в молекулах которой на шесть атомов углерода приходится три гидроксильных группы (24,3 кДж/моль), две группы  $-O-$  (по 4,2–6,7 кДж/моль), одна группа  $-CH_2-$  (2,8 кДж/моль), пять групп  $-CH-$  (по 1,6 кДж/моль). Когезия различных групп, встречающихся в ДПК, составляет от 5,6 кДж/моль до 92,1–97,1 кДж/моль (среднее значение 94,6 кДж/моль). По мере возрастания когезии полимеры располагаются в следующий ряд: ПЭ < ПП < ПВХ < целлюлоза. На рисунке 1 представлены значения когезии атомных групп ДПК, расположенных по мере их уменьшения.



1 – ( $-OH$ ), 2 – ( $-Cl$ ), 3 – ( $-CH_3$ ), 4 – ( $-O-$ ), 5 – ( $-CH_2-$ ), 6 – ( $-CH-$ )  
**Рисунок 1 – Когезия атомных групп ДПК, расположенных по мере их снижения**

Как видно из приведенного рисунка, гидрофильные группы по сравнению с гидрофобными группами, обладают более высокими когезионными свойствами.

**Таблица 2 – Когезия ДПК при весовом соотношении полимер-целлюлоза 50:50**

ДПК на основе	Общая когезия, кДж/моль
ПЭ	50,1
ПП	53,1
ПВХ	55,4

Из таблиц 1 и 2 видно, что механическая прочность термопластов и ДПК на их основе коррелирует с энергией когезии взаимодействующих групп. По возрастанию прочности ДПК полимеры на их основе располагаются в ряд: ПЭ < ПП < ПВХ.

Таким образом, произведен расчет когезии полимеров в ДПК. По мере повышения когезии полимеры располагаются в следующий ряд: ПЭ<ПП<ПВХ<целлюлоза. Определено, что гидрофильные группы имеют более высокие значения когезии, чем гидрофобные группы. Установлено, что прочность ДПК зависит от когезионной прочности используемого полимера.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Барабаш Д. Е. Взаимосвязь когезионных и адгезионных характеристик герметиков на основе жидких каучуков / Д. Е. Барабаш, Г. В. Зеленев // Известия вузов. Северокавказский регион. Технические науки. – 2007. – № 1. – С. 67–71.
2. Тагер А. А. Физикохимия полимеров. – Москва: Научный мир, 2007. – 573 с.
3. Клесов А. А. Древесно-полимерные композиты. – СПб.: Научные основы и технологии, 2010. – 736 с.
4. Кабанов В. А. Энциклопедия полимеров. Т. 3. – Москва: Советская энциклопедия, 1977. – 1152 с.
5. Нигматуллина А. И. Оценка термодинамических свойств древесной муки с полимерами / А. И. Нигматуллина, Н. В. Козлова, А. В. Лысянский // Вестник Казанского технологического университета. – 2018. – Т. 21, № 8. – С. 60–62.
6. Вольфсон С. И. Прогнозирование совместимости компонентов в полимерных композиционных материалах: учебное пособие / С. И. Вольфсон, Н. А. Охотина, А. И. Нигматуллина // Казань: Изд-во КНИТУ, 2023, – 96 с.
7. Поциус А. В. Клеи, адгезия, технология склеивания. – СПб.: Профессия, 2007. – 376 с.
8. Кинлок Э. Адгезия и адгезивы. Наука и технология / Э. Кинлок. – Москва: Мир, 1991. – 484 с.
9. Берлин А. А. Основы адгезии полимеров / А. А. Берлин, В. Е. Басин. – Москва: Химия, 1974. – 392 с.
10. Непомнящих В. В. О связи между поверхностной энергией полимера и механическими свойствами наполненных полиолефиновых композиций / В. В. Непомнящих, Д. И. Лямкин, А. Н. Жемерикин, Г. Ф. Рудаков // Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2021. – Т. 35, № 8. – С. 53–55.