

ВЛИЯНИЕ КРЕМНИЯ НА СВОЙСТВА ПОЛИМЕРОВ

А.Н. Панченко, студент
Волгоградский государственный университет
(Россия, г. Волгоград)

DOI:10.24412/2500-1000-2023-6-4-124-127

Аннотация. В данной статье рассматриваются основные свойства полимеров с атомами кремния. С помощью квантово-химических расчетов изучен процесс адсорбции атома кремния на поверхности полимера – пиролизованного полиакрилонитрила. Рассмотрены пять различных адсорбционных центра на поверхности полимера, определены наиболее эффективные поверхностные центры для адсорбции атома кремния.

Ключевые слова: кремний, адсорбция, полимерная матрица, огнестойкость, ударопрочность.

Кремний – элемент, четвёртая группа, третий период в таблице элементов. Атомный номер 14. Формула кремния – $3s^2 3p^2$. Впервые получен – Ж.Л. Гей-Люссаком и Л.Ж. Тенаром в 1811 г., а в 1834 г. получил русское название «кремний», взамен прежнего «сицилий». Температура плавления 1414°C и кипит при 2349°C . Кремний это главный материал для полупроводниковой техники и, одновременно, один из самых распространенных на Земле элементов. А также, кремний – это элемент, который человечество научилось производить в наиболее чистом виде и выращивать из него самые большие монокристаллы.

Кремний широко используется для повышения механической прочности полимеров. За счет включения добавок на основе кремния или использования полимеров на основе кремния полученные композитные материалы демонстрируют повышенную прочность на растяжение, ударопрочность и твердость. Способность кремния образовывать прочные ковалентные связи с атомами углерода повышает общую стабильность и жесткость полимерной матрицы. Эта усиленная структура также обеспечивает устойчивость к термическому разложению, что делает полимеры на основе кремния пригодными для применения при высоких температурах.

Включение кремния в полимеры оказалось очень эффективным для улучшения их свойств огнестойкости. Добавки на основе кремния действуют как эффективный

барьер, задерживая распространение пламени и уменьшая выделение дыма. Кремнийсодержащие полимеры имеют более низкую горючесть и самозатухание, что делает их желательными для применения в строительной, электронной и транспортной отраслях, где пожаробезопасность имеет первостепенное значение.

Уникальные химические свойства кремния способствуют замечательной химической стойкости кремнийсодержащих полимеров. Эти материалы обладают высокой устойчивостью к растворителям, кислотам и основаниям, что обеспечивает их стабильность и долговечность даже в суровых условиях. Кроме того, включение кремния в полимеры улучшает их газонепроницаемые свойства, что делает их пригодными для таких применений, как упаковочные материалы и мембраны для разделения газов.

Введение кремния в полимеры также произвело революцию в области электроники и оптоэлектроники. Полимеры на основе кремния обладают превосходными диэлектрическими свойствами, что делает их идеальными для изоляционных материалов в электронных устройствах. Кроме того, их способность проводить электричество может быть адаптирована путем модификации структуры полимера, что позволяет разрабатывать гибкие и растяжимые проводящие материалы. Кремнийсодержащие полимеры также используются в органических светоизлучающих диодах (OLED), фотогальванических элемен-

тах и датчиках благодаря их уникальным оптическим и электрическим свойствам [1-2].

Таким образом, введение кремния в структуру полимера изменяет свойства, но не все полимеры могут взаимодействовать с данным элементом. Для получения полимера с кремнием первой задачей является получение устойчивых адсорбционных комплексов «полимер + кремний». Для изучения процесса адсорбции кремния был выбран широко распространенный полимер - пиролизованный полиакрилонитрил [3-5].

Для моделирования процесса адсорбции было рассмотрено 5 адсорбционных цен-

тра на монослой пиролизованного полиакрилонитрила:

- 1) атом углерода;
- 2) атом азота;
- 3) центр связи C-C;
- 4) центр связи C-N;
- 5) центр гексагона.

В первом и во втором случаях атом кремния поэтапно приближался к атомам полимера. Энергия структуры рассчитывалась от 2,8 Å до 1,5 Å с интервалом 0,1 Å. Зависимость данного процесса представлена на рисунке 1. Как видно в этих положениях возможна адсорбция кремния, так присутствует точка минимума на энергетической зависимости.

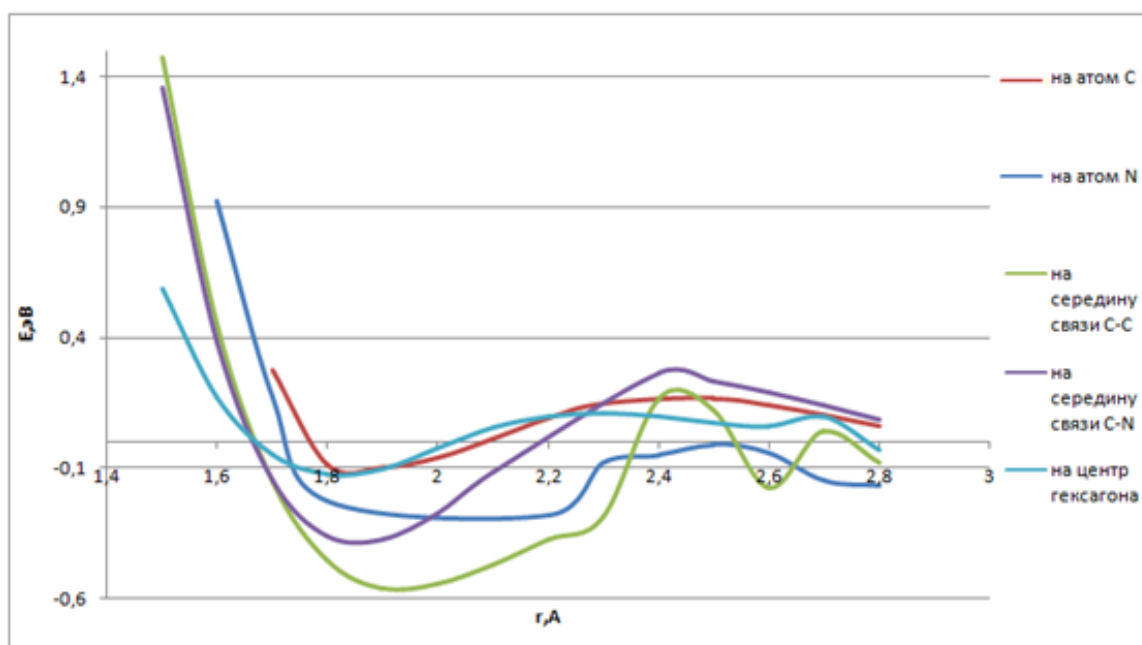


Рис. 1. Зависимость энергии от расстояния атома кремния до поверхности ППАН

На процесс адсорбции влияет выбор адсорбционного центра. Так при адсорбции на атом азота наблюдается следующий факт, атом азота выходит из своего первоначального положения и движется в направлении движения атома кремния, таким образом, атом кремния вытесняет азот из полимерной матрицы, атом кремния об-

разуется две связи с ближайшими атомами углерода (рис. 2). Адсорбция кремния на атоме углерода ППАН происходит следующим образом, находясь на расстоянии 2 Å атом кремния начинает смещаться к центру связи C-C и в результате на расстоянии 1,7 Å начинает образовывать химическую связь с атомом углерода (рис. 2).

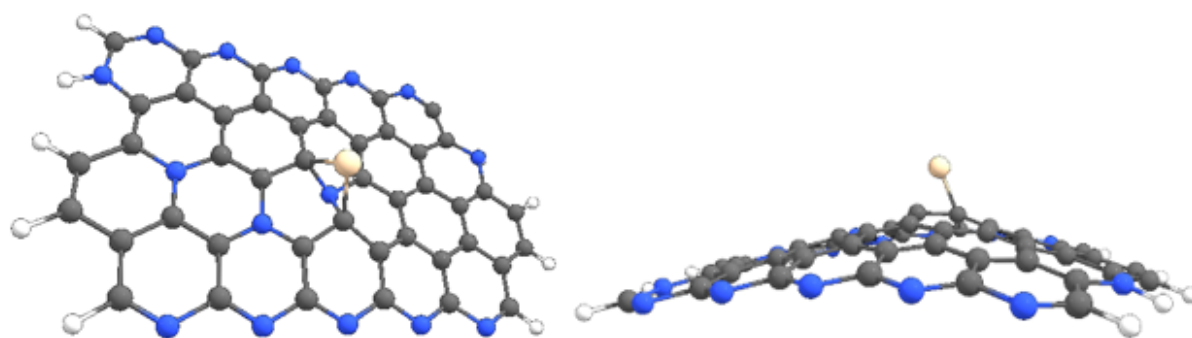


Рис. 2. Процесс адсорбции атома кремния на атом азота и атом углерода поверхности ППАН

Рассмотрение процессов адсорбции для вариантов 3, 4 и 5 позволило определить образование устойчивого адсорбционного комплекса «ППАН + атом кремния». Также были рассчитаны основные характеристики процесса адсорбции: энергия адсорб-

ции, расстояние адсорбции, энергия активации (величина барьера, которую необходимо преодолеть для образования химической связи). Данные значения представлены в таблице.

Таблица. Характеристики процесса адсорбции атома Si на монослое ППАН

№ варианта	$E_{ад}, \text{эВ}$	$E_a, \text{эВ}$	$R_{ад}, \text{Å}$
1	-0,28	0,18	1,8
2	-0,1	0,11	1,9
3	-0,56	0,57	1,9
4	-0,38	0,18	1,9
5	-0,12	0,13	1,8

Включение кремния в полимеры открыло новые горизонты в материаловедении, предлагая множество преимуществ в различных отраслях промышленности. От повышенной механической прочности и термической стабильности до огнестойкости, химической стойкости и биосовместимо-

сти полимеры на основе кремния проложили путь для достижений во многих областях применения. В работе установлено, что можно получить устойчивые адсорбционные комплексы кремния с пиролизированным полиакрилонитрилом.

Библиографический список

1. Пористый кремний и его применение в биологии и медицине / О.И. Ксенофонтова, А.В. Васин, В.В. Егоров [и др.] // Журнал технической физики. – 2014. – Т. 84, № 1. – С. 67-78.
2. Верхунов, С. М. Кремнийсодержащие акрилаты и полимеры на их основе / С.М. Верхунов, А.Е. Петров, Н.И. Кольцов // Вестник Чувашского университета. – 2009. – № 2. – С. 37-42.
3. Simulation of pyrolysed polyacrylonitrile based composite with amorphising boron additives / O.A. Kakorina, I.V. Zaporotskova, I.A. Kakorin, L.V. Kozhitov // Journal of Physics: Conference Series: Applied Mathematics, Computational Science and Mechanics: Current Problems, Voronezh, 11–13 ноября 2019 года. Vol. 1479. – Voronezh: Institute of Physics Publishing, 2020. – P. 012131. – DOI 10.1088/1742-6596/1479/1/012131.
4. Pyrolyzed Polyacrylonitrile Based Composite with Amorphizing Silicon Additives / O. Kakorina, I. Zaporotskova, I. Kakorin [et al.] // Moscow Workshop on Electronic and Networking Technologies, MWENT 2020 – Proceedings, Moscow, 11-13 марта 2020 года. – Moscow, 2020. – P. 9067360. – DOI 10.1109/MWENT47943.2020.9067360.

5. Давлетова, О.А. Структура и электронные характеристики пиролизованного полиакрилонитрила: специальность 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах»: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Давлетова Олеся Александровна. – Волгоград, 2010. – 140 с.

THE EFFECT OF SILICON ON THE PROPERTIES OF POLYMERS

A.N. Panchenko, *Student*
Volgograd State University
(Russia, Volgograd)

***Abstract.** This article discusses the basic properties of polymers with silicon atoms. The process of adsorption of a silicon atom on the surface of a polymer - pyrolyzed polyacrylonitrile – has been studied using quantum chemical calculations. Five different adsorption centers on the polymer surface are considered, and the most effective surface centers for adsorption of the silicon atom are determined.*

***Keywords:** silicon, adsorption, polymer matrix, fire resistance, impact resistance.*