

УДК 678.01:54
ББК Г713:Г57
К72

Косточко А. В.

Прогнозирование совместимости в системе полимер–растворитель : учебное пособие / А. В. Косточко, З. Т. Валишина, О. Т. Шипина; М-во образ. и науки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. – Казань : Изд-во КНИТУ, 2014. – 84 с.

ISBN 978-5-7882-1552-5

Представлена разработка программного комплекса на основе математической модели процесса совместимости в системе полимер–растворитель. Рассмотрены сведения по теории растворимости полимеров и методы определения параметров растворимости полимеров.

Предназначено для использования в процессе обучения магистров по дисциплине «Технология природных и искусственных полимеров», а также аспирантов по специальностям 05.17.07 «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ» и 05.17.06 «Технология и переработка полимеров и композитов».

Подготовлено на кафедре химии и технологии высокомолекулярных соединений.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Казанского национального исследовательского технологического университета

Рецензенты: д-р техн. наук, проф., науч. консультант
директора ФКП «ГосНИИХП» *Н. М. Ляпин*
д-р техн. наук, гл. науч. сотр. ФКП «Казанский
гос. казенный пороховой завод» *Е. Л. Матухин*

ISBN 978-5-7882-1552-5 © Косточко А. В., Валишина З. Т.,
Шипина О.Т., 2014
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2014

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
ВВЕДЕНИЕ	4
1. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ К ОЦЕНКЕ РАСТВОРИМОСТИ ПОЛИМЕРОВ	6
1.1. Основные положения теории Гильдебранда–Скатчарда...	6
1.2. Оценка параметров растворимости полимеров.....	9
1.3. Способы использования концепции трехмерного параметра растворимости.....	11
1.4. Параметры растворимости смесевых растворителей.....	13
1.5. Фазовое равновесие в системе полимер–растворитель.....	15
1.6. Теоретические предпосылки к оценке растворимости нитратов целлюлозы.....	20
1.7. Расчет теплоты смещения двух компонентов по закону Гесса.....	23
1.8. Расчет числа степеней свободы f с помощью правила фаз.....	24
1.9. Определение δ полимеров по инкрементам энергии атомов.....	24
1.10. Выбор растворителя с использованием кругов растворимости.....	29
1.11. Определение когезионных характеристик нитратов целлюлозы.	30
2. МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРА РАСТВОРИМОСТИ ПОЛИМЕРОВ	31
2.1 Расчетные методы определения параметра растворимости.....	31
2.2 Экспериментальные методы оценки параметра растворимости.....	39
2.3 Расчет параметра растворимости и силы водородной связи нитратов целлюлозы и растворителей.....	46
2.3.1. Расчет параметра растворимости и силы водородной связи нитратов целлюлозы.....	45
2.3.2. Расчет параметра растворимости и силы водородной связи растворителей.....	48

2.4. Факторы, влияющие на растворимость нитрата целлюлозы.....	49
3. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ.....	52
4. СОЗДАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА СОВМЕСТИМОСТИ В СИСТЕМЕ ПОЛИМЕР–РАСТВОРИТЕЛЬ.....	52
4.1. Исходные данные.....	52
4.2. Основные этапы построения математических моделей...	57
4.3. Математическая модель.....	57
4.4. Программный комплекс.....	58
4.5. Построение кругов растворимости для НЦ (N=12 %) и НЦ (N=13 %)	62
5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	65
6. БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК.....	66
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	68

Редактор Е.И. Шевченко

Компьютерный набор и дизайн А.А. Александров

Подписано в печать 27.08.2014	Формат 60×84/16
Бумага офсетная	Печать Riso 4,88 усл. печ. л.
5,25 уш.-изд. л.	Тираж 60 экз. Заказ «С» 37

Издательство Казанского национального исследовательского
технологического университета

Офсетная лаборатория Казанского национального
исследовательского технологического университета

420015, г. Казань, К. Маркса, 68