

УДК 544.6.018.47-036.5

**ИЗУЧЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ ПРОВОДИМОСТИ
СМЕСЕВЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ
ОТ СОВМЕСТИМОСТИ ПОЛИМЕРОВ В КОМПОЗИЦИИ**

Д. В. ЕЖОВ, Т. Б. ЧЕНТЕМИРОВ

Научный руководитель А. Н. ГАЙДАДИН, канд. техн. наук, доц.
Волгоградский государственный технический университет
Волгоград, Россия

Твердые полимерные электролиты (ТПЭ) все чаще рассматриваются в качестве альтернативы классическим жидким электролитам за счет пожаробезопасности, меньшей токсичности и возможности придавать им любую необходимую форму нужного размера. Среди ТПЭ отдельный интерес представляют электролиты на основе смесей полимеров. Предположительно, в полимерной матрице таких электролитов образуется межфазный слой, в который диффундируют ионы соли, в результате чего в нем значительно возрастает концентрация ионов соли в сравнении с полимерными фазами, что приводит к росту ионной проводимости.

Прогноз совместимости полимеров оказывает ощутимое влияние на эксплуатационные характеристики таких композиций. Классические методы прогноза совместимости, основанные на определении параметров совместимости по теории Флори – Хаггинса, не учитывают строение и сегментарную подвижность полимеров, что нередко приводит к ошибочным прогнозам. В связи с этим ранее был предложен квантовохимический метод прогноза совместимости, основанный на определении изменения полной энергии системы полимер – полимер с помощью программного обеспечения Hyper Chem. Расчет проводился в чистом рабочем поле программы, а также с использованием периодического бокса, позволяющего аппроксимировать большую систему к размеру элементарной ячейки [1]. По предложенному методу полимерная пара предполагается совместимой, если изменение полной энергии системы отрицательно. Расчет проводился для полимерных пар: поливинилиденфторид – гидрированный бутадиеннитрильный каучук (ПВДФ-ГБНК), поливинилиденфторид – полиэтиленоксид (ПВДФ-ПЭО), поливинилиденфторид – полиметилметакрилат (ПВДФ-ПММА) и поливинил-иденфторид – полипропиленкарбонат (ПВДФ-ППК). Полученные значения были сопоставлены с данными по ионной проводимости электролитов на основе данных полимерных пар (рис. 1 и 2). В итоге зависимость ионной проводимости смесевых полимерных электролитов от совместимости составляющих их полимеров наблюдается для выбранных методов расчета, проведенных ранее [1]. Таким образом, подтверждается возможность более аргументированного выбора полимеров для разработки полимерных смесей при изготовлении твердых полимерных электролитов.

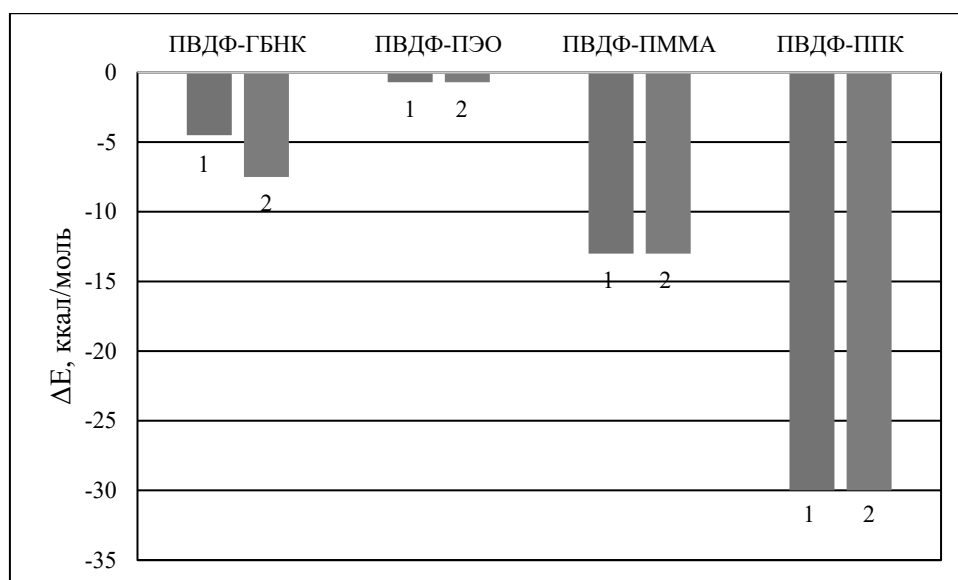


Рис. 1. Результаты расчета совместимости полимерных пар в чистом рабочем поле программы (1) и в периодическом боксе (2)

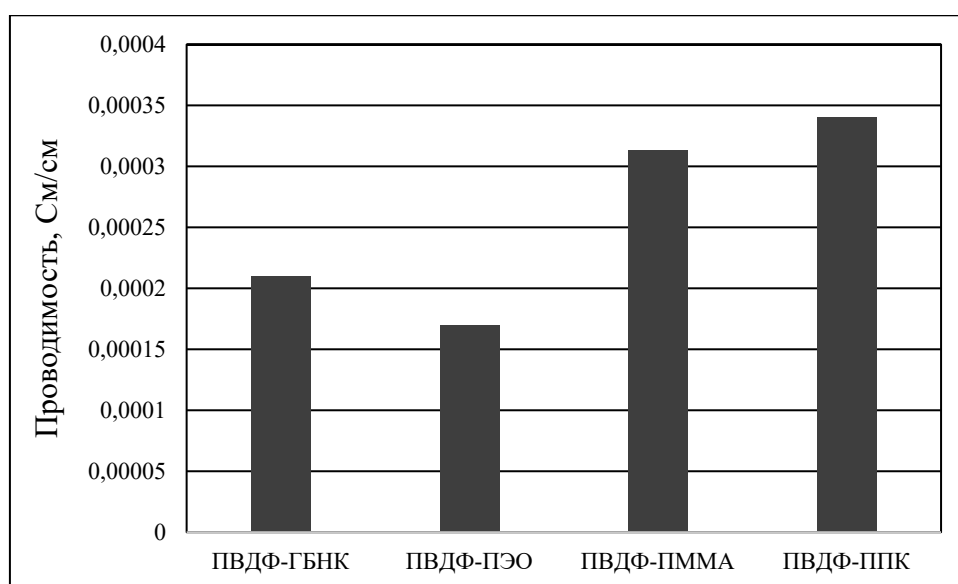


Рис. 2. Результаты проводимости смесевых полимерных электролитов

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ежов, Д. В.** Прогнозирование совместимости полимеров для полимерных электролитов полуэмпирическим квантовохимическим методом / Д. В. Ежов, А. Н. Гайдадин, В. В. Климов // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2024. – № 12 (295). – С. 109–117.