

Номер Соглашения о предоставлении субсидии: **14.613.21.0024**

**Тема: «Многомасштабное моделирование и экспериментальное исследование армированных наноцеллюлозой биополимерных нанокомпозитов с улучшенными эксплуатационными свойствами»**

Приоритетное направление: Индустрия наносистем

Критическая технология: Нано-, био-, информационные, когнитивные технологии

Период выполнения: 28 ноября 2014 г. – 31 декабря 2014 г.

Плановое финансирование проекта: 26 млн. руб.

Бюджетные средства 13 млн. руб.,

Внебюджетные средства 13 млн. руб.

Получатель/Исполнитель: ФГБУН Институт высокомолекулярных соединений РАН

Индустриальный партнер: Institute of polymers technology and nanotechnology, Argentina

Ключевые слова: биополимеры, бионанокомпозиты, нанотехнология, наноцеллюлоза, экологичная упаковка, многомасштабное моделирование, молекулярная динамика, квантово-химический расчет парциальных зарядов, самосогласованное поле.

## **1. Цель проекта**

Целью проекта является получение значимых научных результатов о молекулярных механизмах, обуславливающих свойства бионанокомпозитов на основе коммерческих биоразлагаемых полимеров и наноцеллюлозы, и разработка научных и технологических основ производства таких бионанокомпозитов с улучшенными механическими, теплофизическими и антимикробными свойствами. Достижение данной цели позволит снизить техногенную нагрузку на окружающую среду за счёт использования экологически безопасной технологии производства и биосовместимости разрабатываемых материалов.

## **2. Основные результаты проекта**

В рамках данного проекта на первом этапе с использованием метода атомистической молекулярной динамики показано, что наибольшую температуру стеклования имеет система из чистого ПЛА, наименьшую – система из чистого ОЛА, а температуры стеклования для смесей ПЛА и ОЛА лежат между ними. Этот результат находится в согласии с экспериментальными данными. Показано, что определенные по зависимостям напряжения от деформации значения модуля упругости совпадают, в пределах погрешности, с данными эксперимента. Разработаны молекулярные модели кристаллов наноцеллюлозы на основе кристаллографических данных о структуре целлюлозы I $\beta$ . Разработана методика на основе метода самосогласованного поля (ССП) для изучения композитов с привитыми к нанонаполнителю полимерными цепями, апробирована методология моделирования с учетом различной жесткости цепей. Развита теория адсорбции одиночной цепи гомополимера на химически неоднородной поверхности, состоящей из чередующихся параллельных полос двух типов, имеющих разное сродство к мономерному звену. Показано, что случайная поверхность обладает лучшей способностью адсорбировать полимер, чем «референтная» регулярная система. Зарубежными партнерами проведено экспериментальное изучение вопросов изготовления и свойств образцов ПЛА с добавлениями ОЛА. Показано, что величины температуры термической деградации отличаются на несколько десятков градусов в зависимости от способа синтеза ОЛА, различия между величинами

температуры стеклования не превышают 20 градусов. Показано, что предельное растяжение для чистого ПЛА меньше в 50-60 раз, чем для смесей ПЛА и ОЛА, что говорит о высокой эффективности ОЛА как пластификатора.

На втором этапе работ по проекту разработан подход к атомистическому моделированию кристаллической целлюлозы, позволяющий моделировать наполненные наноцеллюлозой нанокомпозиты аморфного ПЛА. Разработан метод создания и уравнивания нанокомпозита из полимолочной кислоты (ПЛА), где в качестве матрицы использовался предварительно уравновешенный ПЛА. Показано отсутствие упорядочивающего влияния наноцеллюлозы на ПЛА и увеличение модуля упругости ПЛА при введении наноцеллюлозы, что согласуется с экспериментом. Методом ССП показано, что наиболее эффективна плотная модификация поверхности наночастицы полимерными пришивками, а диспергируемость наночастиц растёт с уменьшением молекулярной массы полимерных цепей. Разработан метод модификации цепями молочной кислоты наноцеллюлозы. Иностраным партнёром на основе анализа экспериментальных данных составлен перечень сельскохозяйственных растительных культур, оптимальных для выделения наноцеллюлозы: Phormium Tenax, лён, бамия, конопля, подсолнечник, водоросли Poseidonia Oceanica. Для выбранных культур адаптированы методы кислотного и ферментативного гидролиза, методы предварительной обработки растений и выделяемых волокон, а также методы тестирования качества продукта. Разработана технология получения бактериальной наноцеллюлозы на средах, более дешёвых, чем глюкоза.