****

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования**

**«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет**

**им. Н.И. Лобачевского»**

**(ННГУ)**

**ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**КАФЕДРА ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

**ОТЧЕТ ПО ПРОИЗВОДСТВЕННОЙ ПРАКТИКЕ**

**(НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ)**

**Математическое моделирование – реакции фотовосстановления о-хинонов в присутствии третичных аминов**

Заведующий кафедрой физической химии:

д.х.н., профессор

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ Маркин А.В.

Руководитель практики:

к.х.н., доцент кафедры физической химии

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Арсеньев М. В.

Исполнитель:

студент 4 курса ОФО группы 0219С-ФХ

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Крайнов И. О.

г. Нижний Новгород

2023 г

Введение

В настоящее время в химии высокомолекулярных соединений активно развивается научное направление, связанное с изучением процессов фотополимеризации. Фотополимеризация — это процесс полимеризации, инициируемый электромагнитным излучением. Ее применяют, например, для изготовления полимерных сеток с высокой степенью сшивания, при котором инициирование химико-физической реакции происходит путем воздействия на светочувствительные, монофункциональные или многофункциональные мономеры источника света высокой интенсивности, обычно ультрафиолетового, но иногда ИК и видимого. Ультрафиолетовое излучение наиболее известно плохим воздействием на органические соединения, при длительном воздействии солнечного света. Оно разрушает химические связи, ультрафиолетовое излучение вызывает серьезные изменения механических и оптических свойств полимерных материалов, тем самым сокращая срок их службы при наружном применении. Однако оно также может использоваться для инициирования полимеризации.

Моделирование подобных брутто-процессов фотополимеризации хорошо описывается рядом математических моделей, однако не позволяет соотнести свойства инициирующих систем с наблюдаемыми результатами. В первую очередь из-за того, что при моделировании полимеризации обычно не уделяется должного внимания самому процессу фотоинициации, а этот этап определяется набором элементарных реакций и сильно зависит от строения и свойств реагирующих в ходе засветки веществ.

1. Актуальность работы

Само же явление фотополимеризации имеет множество применений как в научной, так и в технической сферах. По словам крупного исследователя полимеризации инициируемой УФ светом Декера [[1]](#_CTVL00102ba0894b4054580acd6a36cb9b208a8), именно она является одним из наиболее эффективных методов достижения квазиминутной полимеризации т.е. полимеризации с очень высокой скоростью реакции. Ее огромный потенциал в простом и быстром производстве материалов с особыми свойствами приводит к широкому спектру потенциальных применений. Практические приложения включают, например, нанесение покрытий [[2]](#_CTVL001ae62df1c2426409396dee33b3c34f31c), тканевую инженерию [[3]](#_CTVL0010b5c196a7662405c85dc864fb3134b46), фотолитографию [[4]](#_CTVL00151b2b1ee088e4183b1fc32db850d3839), изготовление микрожидкостных устройств [[5]](#_CTVL001ab75b46309be4ee5b38c04fd1e949d34), 3D-прототипирование [[6]](#_CTVL001b8a662bd057c4565858afb9872ef0c97) и 4D-биопечать [[7]](#_CTVL0011b6dea1e39f14210ba312914715a2ca3). Фотополимеризация так же применяется в оптике, медицине, полиграфии, оптоэлектронике. Метод фотоинициируемой радикальной полимеризации популярен еще и из-за того, что он позволяет проводить реакции при комнатной температуре и без растворителя, а также управлять скоростью и местом реакции.

Системы на основе о-бензохинонов давно изучаются в лаборатории ФППМ ИМХ РАН [[9](#_CTVL0013ed82feb036c426882177cbc61643b4d)[, 10]](#_CTVL00154e8fde31d3f492b8d2eb336a57901c0). Изменение функциональных групп (включая полимеризационноспособные) на периферии структуры этих соединений дает возможность улучшать важные для практики свойства фотополимерных композиций на их основе. Для получения знаний о влиянии каждого фактора на свойства всей системы в целом необходимо каждый раз проводить эксперимент при изменении типа инициатора (даже если изменения незначительны), концентрации остальных веществ, что неудобно и достаточно затратно, к тому же не исключен риск ошибки во время синтеза или измерений.

Математическое моделирование такой системы даст возможность прогнозировать эти свойства. А также оптимизировать некоторые параметры, такие как интенсивность излучения, концентрацию мономера и о-бензохинонов для получения желаемого эффекта, найти наилучшее строение фотоинициатора для заданных задач. Такая модель позволит лучше объяснить механизм реакции и составить комплексное понимание процессов в данной и подобной ей системах.

1. Цель работы

На данном этапе целью работы является оценка значений коэффициентов диффузии для задания параметров в математической модели фотополимеризации олигокарбонатметакрилатов в присутствии растворителя и фотоинициаторов - о-хинонов.

1. Задачи работы

В соответствии с данной целью решались следующие задачи:

1. Проведение эксперимента для нахождения вязкости композиции при разных составах и температурных условиях
2. Вычисление оценок коэффициентов диффузии согласно выбранной модели диффузии
3. Нахождение зависимости коэффициентов от состава и температуры
4. Оценка достоверности полученных результатов

Литературный обзор

1. Общие сведения
2. Диффузионные модели
3. Методы нахождения коэффициентов диффузии
   1. Методы нахождения вязкостей
4. Основы регрессионного анализа
   1. Основы

абражеев

* 1. МНК
  2. Оценка коэффициентов

Экспериментальная часть

Для оценки коэффициентов диффузии использовалось модель…

Для получения зависимости вязкости от состава была проведена серия нескольких экспериментов с разным содержанием растворителя в среде мономера. Чистый мономер разбавлялся спиртом в нужной пропорции до нужной концентрации бутанола-1. Для этого состава производилось вычисление вязкостей при плавном изменении температуры, чтобы уменьшить искажение результатов. Измерялась также плотность состава при комнатной температуре. После чего происходило разбавление композиции, и процедура повторялась вновь.

Объектами исследования стали:

Мономеры: OCM-2, PETA, DMAG

Растворитель – бутанол-1

Диапазон содержания бутанола-1 в смеси: 0-20% по массе

Температурный диапазон: от 15-14 С

Опыт с OCM-2 состава от 0 до 20 % бутанола-1 с шагом 2,5% и температурным шагов около 1-2 С был тщательно проведен, чтобы достаточно точно оценить зависимости и величину погрешностей при проведении эксперимента. Остальные же опыты с PETA, DMAG проведены с шагом 5%.

Вычисление вязкости проводилось с использованием апарата.

Для снятия показаний вязкости и температуры с прибора использовалась вебкамера, которая записывала видео с дисплея прибора. После чего видео поступало на обработку и коррекцию цвета и размера изображения. Полученное обработанное видео поступала на вход оригинальному программному комплексу, основанному на системе распознавания изображений Tesseract OCR. Для каждого кадра видео (частота дискретизации видео была выбрана равной 1 FPS) выделалось несколько областей, соответствующих положениям отдельных значений на дисплее, далее программа распознавала полученные участки и проверяла корректность полученных значений. Результатом работы программы была таблица вида:

На начальном этапе заведомо ошибочные значения вязкость - температура фильтровались с помощью простого ограничения на диапазон значений вязкости и температуры. Чтобы учесть начальные колебания температуры и вязкости в системе и исключить их из рассмотрения, для некоторых экспериментов удалялись первые несколько (1-2) минут.

После чего данные преобразовывались к линейному виду вид, и использовался IQR фильтр параметры фильтра для нахождения и отбраковки выбросов:

Полученные очищенные данные использовались для аппроксимации формулой формула с помощью МНК. Проводилась статистическая оценка полученных коэффициентов уравнения регрессии: график и таблица

Для визуальной оценки ошибки значения приводились к нелинейному виду с наложением аппроксимирующей кривой:

Сравнение