

Моделирование процесса полимеризации эпоксидной смолы

А.Н. Загаринская, МБОУ Новолеушинская СОШ Тейковского муниципального района
Ивановской области, с.Новое Леушино.

Научный руководитель – учитель высшей категории, О.Г Кирютина, МБОУ Новолеушинская
СОШ Тейковского муниципального района Ивановской области, с.Новое Леушино.

Эпоксидные смолы нашли широкое применение в современном мире, но их полное лабораторное исследование не всегда возможно по разным причинам. Решить эту проблему я предлагаю методом математического моделирования при изучении кинетики процесса полимеризации эпоксидной смолы в домашней лаборатории с применением компьютерного эксперимента, модель которого можно усовершенствовать и применять в дальнейшем.

Гипотеза: должны совпасть результаты компьютерного и лабораторного экспериментов по моделированию процесса полимеризации эпоксидной смолы.

Цель работы - изучить кинетику процесса полимеризации эпоксидной смолы в домашней лаборатории с применением математического моделирования.

Задачи:

1. Изучить литературу по эпоксидной смоле и реакциям полимеризации, по технике безопасности при работе с ней;
2. Ознакомиться с методами математического моделирования химических реакций;
3. Составить математическую модель, описывающую процесс полимеризации во времени;
4. Уточнить параметры модели из литературных источников;
5. Провести компьютерный и лабораторный эксперимент, сравнить результаты.

Методы работы: теоретический – моделирование; эмпирический – лабораторные опыты и компьютерный эксперимент в Mathcad, моделирование процесса полимеризации эпоксидной смолы; математический – работа с дифференциальными уравнениями, расчет кинетики отверждения системы методом Монте-Карло.

В домашней лаборатории были проведены 3 опыта при различных температурах: +5, +23, +40°C. К эпоксидной смоле был добавлен отвердитель, после чего мы засекали время ее отверждения при различных температурах. Результат получился ожидаемым: в холодильнике время отверждения составило 76 часов, при температуре 23°C – 12,5 часов и на батарее – 3,5 часа. Можно сделать вывод о том, что при повышении температуры увеличивается скорость протекания реакции.

Далее был проведен компьютерный эксперимент при тех же значениях температуры, что были в предыдущем опыте. Исследования проводились в программе Mathcad, построении графиков зависимостей по дифференциальному уравнению.

Построили графики зависимости степени превращения от времени. Результаты опыта получились схожими с результатами лабораторного эксперимента. Результаты практически равны, несмотря на то, что имеют небольшую погрешность в 2-3 часа. Так как это приближительная модель, такая погрешность является допустимой.

Изучение кинетики эпоксидных смол очень важно для химии. При помощи компьютерного и лабораторного эксперимента была показана эффективность математического моделирования кинетики реакции полимеризации эпоксидной смолы. Данный метод можно рекомендовать для более сложных исследований кинетики. Усовершенствованная модель может использоваться на производстве. В проекте вы можете увидеть результат применения моего исследования в создании украшений, которые я дарю близким, ношу сама и веду профиль в Instagram.