

В.В. Шибанов, К.Ф.Базилюк

КОМП'ЮТЕРНИЙ СИНТЕЗ ФОТОПОЛІМЕРИЗАЦІЙНОЗДАТНИХ МАТЕРІАЛІВ

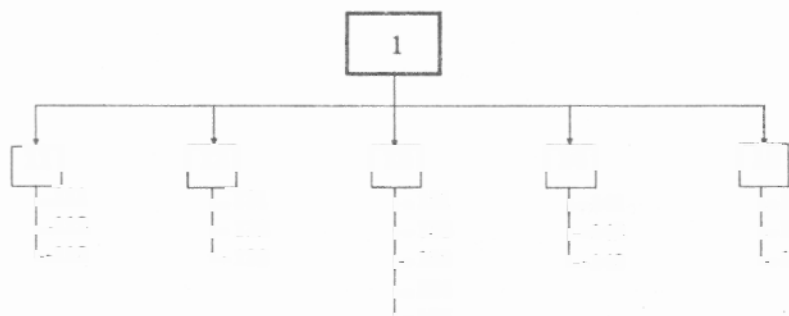
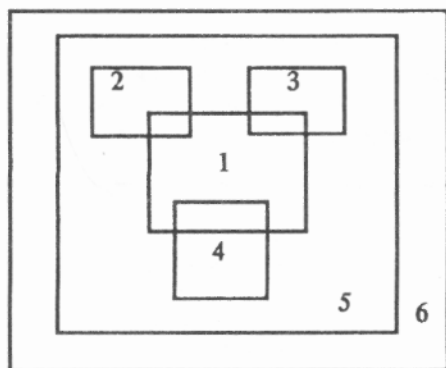
Фотополімеризаційноздатна композиція (ФПК) — це багатокомпонентна суміш індивідуальних хімічних речовин, які під дією ультрафіолетового чи видимого світла набувають фотохімічних і/або фотофізичних змін, що супроводжується утворенням просторових полімерів та зміною фізико-хімічних і фізико-механічних властивостей вихідних речовин.

Властивості ФПК не адитивні властивостям її компонентів і визначаються характером хімічних і фізико-хімічних процесів, які мають місце при переробці та зберіганні композицій. Таким чином, ФПК — це не механічна суміш компонентів, а нова субстанція, якій притаманні суто індивідуальні і своєрідні властивості, що досягається цілеспрямованим сполученням окремих компонентів. Тому фізико-хімічний процес утворення такої композиції можна визначити як хімічний синтез.

Існує, принаймні, три стратегічних напрямки синтезу ФПК. Перший, традиційний не лише для ФПК, ґрунтується на методі «проб і помилок». Він найменше потребує інформаційного забезпечення, але дуже трудомісткий і малопродуктивний. Другий відрізняється пошуком оптимального складу композицій не шляхом інтуїтивного перебору практично безмежного числа варіантів складу композицій, а визначеною програмою, яка базується на теорії математичного планування експериментів. Третій напрямок ґрунтується на теоретичних знаннях про кінетику і механізм процесів у ФПК, відомостях про взаємозв'язок між хімічною природою та комплексом властивостей компонентів і кінцевого матеріалу.

Труднощі визначення прийнятної методу синтезу ФПК визначаються перш за все багатофункціональним характером залежностей між властивостями ФПК, природою і кількісним складом компонентів.

Досягнутий рівень емпіричних і теоретичних знань у галузі синтезу ФПК та чималий запас науково-технічної інформації дозволяють значно прискорити процес визначення базового варіанту ФПК, використовуючи метод комп'ютерного синтезу. Суть методу полягає в машинному виборі та оптимізації складу ФПК математичними методами на основі баз даних про компоненти та відомі ФПК,



Метод автоматизованого прогнозування і вибору оптимального складу матеріалів на основі структурно-інформаційного аналізу було успішно використано для розробки мастильно-охолодних рідин [3] і гумових сумішей [2], визначення реакційної здатності речовин [1]. Ми розробили автоматизовану інформаційно-пошукову систему вибору та оптимізації складу ФПК.

У запропонованому варіанті основні елементи системи пошуку (1а, 1б, 2а, 2б) можуть функціонувати (при потребі) в автономному режимі. База даних про ФПК і компоненти містить інформацію в обсязі таблиці дискрипторних груп тезауруса:

Код дискрипторного поля	Назва дискрипторного поля і дискрипторної групи	Код дискриптора
1	Механізм фотохімічних процесів: фотоініційована радикальна полімеризація фотоініційована катіонна полімеризація фотоініційована аніонна полімеризація фотодимеризація, фотоциклізація фотоприєднання резерв	R1 K1 A1 C1 Z1 X1
2	Компонентний склад композицій: фотополімерна основа різні типи полімерів, всього 14 фотоініціатори різні типи фотоініціаторів, всього 27 мономери різні типи мономерів, всього 15 модифікатори різні типи модифікаторів, всього 35	P2 P2.1 до P2.14 F2 F2.1 до F2.27 B2 B2.1 до B2.15 M2 M2.1 до M2.35
3	Фізичні властивості і конструкція перелік різних параметрів	K3 K3.1 до K3.16
4	Технологія виготовлення матеріалів перелік різних технологій	T4 T4.1 до T4.10
5	Технологія виготовлення форм перелік різних технологій	T5 T5.1 до T5.20

Код дискрипторного поля	Назва дискрипторного поля і дискрипторної групи	Код дискриптора
6	Експлуатаційні параметри матеріалів перелік різних параметрів	E6 E6.1 до E6.15
7	Кон'юнктура виробництва і сфери застосування перелік різних факторів	S7 S7.1 до S7.45

Таблиця дискрипторних груп містить інформацію про числове і буквене кодування кожного дискриптора, яке використовують для формування відповідної бази даних. Підставою для віднесення дискриптора до конкретної групи є його належність до конкретної області. Відповідно до цього кожний дискриптор має індивідуальну позначку.

База даних про властивості композицій і їх компонентів містить інформацію, яку використовують для вибору компонентів, гіпотетичного складу композиції та її оптимізації. Структура запропонованого нами [4] програмного забезпечення автоматизованої системи комп'ютерного синтезу ФПК наведена на рис.3.



Рис. 3. Блок-схема автоматизованої системи комп'ютерного синтезу фотополімеризаційчоздатних композицій.

Пакет програмного забезпечення по розрахунку адитивних параметрів розчинності, взаємодії, сумісності, оптичних і фізико-механічних параметрів дозволяє вибрати потрібні компоненти для попереднього складу ФПК. Попередні рекомендації по синтезу композицій на основі вибраних компонентів формуються з врахуванням складу і властивостей найбільш близьких за складом реальних ФПК з бази даних. Оптимізація здійснюється методами математичного планування експерименту.

1. Ускова С.В., Мизеровский Л.Н., Китаев В.П. и др. Использование микро-ЭВМ для расчета состава бинарных смесей эластомеров, устойчивых к действию физически активных сред // Деп. ВИНТИ № 2341-ЛП. 1987. 2. Чулок А.И. Использование вычислительных машин в химических исследованиях и спектроскопии молекул // Тез. докл. 7-ой Всесоюз. конф. Рига. 1986. 3. Чулок А.И., Кафаров В.В. Методы математического моделирования в химии и технологии смазочно-охлаждающих жидкостей // Итоги науки и техники. ВИНТИ. Сер. Процессы и аппараты химической технологии. М., 1989. В.17. 4. Шибанов В.В., Базилюк К.Ф. Інформаційно-пошукова та прогнозна система «Фотополімер» // Тези доп. наук.-техн. конф. за 1992 р. УПІ ім. Івана Федорова. Львів, 1993. В.1.

Стаття надійшла до редколегії 11.01.96