

УДК 519.245:519.248.21:538.9: 541.6

Р. Р. ИСМАИЛОВ, Э. Д. ШАКИРЬЯНОВ, С. М. УСМАНОВ

МОДЕЛЬ ТРЕХМЕРНОЙ СВОБОДНО-РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОГО МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО

Методом Монте-Карло на кубической решетке 100x100x100 выполнен численный эксперимент по трехмерной свободно-радикальной полимеризации диаллизофтала. Исследовано влияние скорости реакции передачи цепи на мономер и количества занимаемых узлов в кубической решетке молекулы мономера на кинетические характеристики полимеризации. *Монте-Карло ; радикальная полимеризация ; численный эксперимент ; диаллизофталат*

Значительное практическое использование на сегодняшний день получили полифункциональные мономеры и олигомеры (олигоэфиракрилаты, олигоаллилпроизводные и др.), конечным продуктом радикальной полимеризации которых является трехмерный полимер. Изучение механизма формирования трехмерных полимеров привлекает широкое внимание исследователей. Практический интерес представляет полимеризация диаллиловых мономеров, поскольку образующиеся полимеры обладают высокими физическими, электрическими, оптическими и другими характеристиками. Полимеры на основе аллиловых мономеров находят большое применение в технике. При сополимеризации с другими мономерами и полимерами получены материалы, обладающие высокой механической прочностью, термо- и хемостойкостью, хорошими изоляционными и адгезионными свойствами. Синтезированные материалы используются в качестве волокон, пленок, покрытий, оптических стекол, связующих для армированных пластиков и т. д. [1–4].

КИНЕТИКА ПРОЦЕССА СВОБОДНО-РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ДИАЛЛИЛ-ИЗОФТАЛАТА

В общем виде процесс радикальной полимеризации диаллизофтала (ДАИФ) состоит из следующих элементарных стадий.

Инициирование. Стадия инициирования состоит из двух реакций. Первая заключается в создании в реакционной системе первичных радикалов, способных начать реакционные цепи.

Наиболее распространенный метод основан на осуществлении в среде мономера термического гомолитического распада нестойких веществ-инициаторов.



где I – молекула инициатора; R_0 – образующиеся радикалы; k_d – константа скорости реакции распада инициатора. Скорость распада инициатора V_d связана с его концентрацией $[I]$ следующим соотношением:

$$-\frac{d[I]}{dt} = V_d = 2k_d[I]$$

Вторая стадия инициирования заключается в присоединении первичного радикала к первой молекуле мономера с образованием макрорадикала:



где M – молекула мономера; k_i – константа скорости реакции инициирования. Тогда для скорости инициирования получим следующее соотношение:

$$V_i = k_i[R_0][M], \quad (3)$$

где $[R_0]$ – концентрация первичных радикалов, $[M]$ – концентрация мономера.

Первичные радикалы обладают высокой активностью, и сразу же вслед за распадом инициатора они присоединяются к молекулам мономера и иницируют процесс. Поскольку реакция (2) протекает гораздо быстрее, чем реакция (1), поэтому скорость инициирования определяется стадией распада инициатора:

$$V_i = 2k_d[I], \quad (4)$$

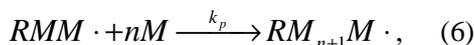
где $[I]$ – концентрация инициатора.

Уравнение (4) справедливо только в том случае, если все радикалы, образующиеся при распаде инициатора, эффективно используются для иницирования полимеризации. В действительности, некоторые из радикалов расходятся непродуктивно и теряются в результате различных побочных реакций, например, реакции рекомбинации. Если обозначить через f долю радикалов, образующихся при распаде инициатора, которая эффективно используется на реакцию иницирования, то уравнение для скорости иницирования необходимо модифицировать:

$$V_i = 2fk_d[I]. \quad (5)$$

Значение f обычно лежит в пределах от 0,5 до 1,0. Например, величина $f = 0,6$ означает, что только 60% радикалов, образующихся при распаде инициатора, иницируют полимеризацию, а оставшиеся 40% расходуются на побочные реакции.

Рост цепи осуществляется последовательным присоединением молекул мономера к макрорадикалам, возникающим в результате иницирования. Реакцию роста можно представить следующим образом:



где k_p – константа скорости реакции роста. Скорость реакции роста определяется следующим соотношением:

$$-\frac{d[M]}{dt} = V_p = k_p[M \cdot][M], \quad (7)$$

где $[M \cdot]$ – концентрация полимерных радикалов.

Передача цепи. Известно, что в отличие от мономеров винилового ряда, обычно легко полимеризующихся под действием радикальных инициаторов до высокомолекулярных продуктов, моноаллиловые мономеры общей формулы $CH_2=CH-CH_2-X$ полимеризуются по радикальному механизму с очень низкими скоростями и образуют олигомерные продукты ($P_n = 3-30$) [2, 3]. Столь резкие различия в поведении виниловых и аллиловых мономеров объясняются присутствием в молекулах последних CH_2 -групп в α -положении к двойной связи.

При атаке молекулы диаллилового мономера активным радикалом наряду с присоединением по двойной связи с высокой вероятностью может произойти отрыв атома водорода от α - CH_2 -группы. Это приводит к гибели исходного активного радикала и к образованию малоак-

тивного аллильного радикала, стабилизированного внутренним напряжением. Аллильные радикалы могут с достаточно высокой скоростью присоединяться к малоактивной двойной связи аллилового мономера при температурах выше 300–400°C или под давлением в несколько килобар (5÷20) [3, 4]. При обычных условиях вероятность продолжения кинетической цепи близка к нулю. В основном, они расходуются путем рекомбинации. Поэтому отрыв α -водорода растущим радикалом означает гибель как материальной, так и кинетической цепи. Такой процесс носит название деградиционной передачи цепи [2–4,6].

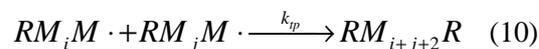


где k_{deg} – константа скорости реакции деградиционной передачи цепи; $A \cdot$ – малоактивный аллильный радикал.

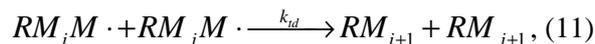
Деградиционная передача, конкурируя с реакцией роста, приводит к крайне низким скоростям полимеризации диаллиловых мономеров и образованию продуктов с невысокими молекулярными массами [2, 4]. Наряду с деградиционной передачей цепи существует эффективная передача, после которой сохраняется возможность продолжения цепной реакции.



Обрыв цепи. Завершает полимеризацию реакция обрыва цепи, которая представляет собой прекращение процесса роста полимерной цепи и приводит к ограничению кинетических и материальных цепей. При этом происходит исчезновение в системе активных радикалов или их замена менее активными радикалами. В общем случае обрыв происходит в результате взаимодействия двух радикалов, которые могут или соединяться с образованием одной макроцепи (реакция рекомбинации)



или диспропорционировать с образованием двух полимерных молекул



где k_p и k_{td} – константы скорости обрыва путем рекомбинации и диспропорционирования, соответственно. Скорость реакции квадратичного обрыва цепи запишется в виде

$$-\frac{d[R \cdot]}{dt} = V_t = k_t [R \cdot]^2. \quad (12)$$

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ КИНЕТИКИ ПРОЦЕССА ТРЕХМЕРНОЙ СВОБОДНО РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ДИАЛЛИЛИЗОФТАЛАТА

При росте полимерной цепи ДАИФ образуются подвешенные двойные связи D , которые также могут вступать в реакцию с макрорадикалом, образуя сшивки и циклы в полимерных цепях. При такой реакции в системе появляется «менее активный» макрорадикал R' , реакционная способность которого на порядок меньше [8]. В дальнейшем этот макрорадикал R' , вступая в реакцию с мономером, превращается в активный макрорадикал R и т. д.

С учетом в системе подвешенных двойных связей D , процесс моделирования полимеризации включал следующие стадии: инициирование цепи R_0+M (первоначальное) и R_0+D , рост цепи $R+M$ и $R'+M$, циклизацию и сшивание цепей $R+D$ и $R'+D$, деградиационную передачу цепи на мономер $R+M$ с образованием аллильного радикала, эффективную передачу цепи на мономер $A+M$, обрыв цепи (с циклизацией и сшиванием цепей) $R+R$, $R+R'$ и $R'+R'$, где M – мономер, R – активный радикал (он соединен с одной макроцепью i -го поколения), R' – менее активный радикал (он соединен с двумя макроцепями разных поколений, причем для R' приняты $k'_p = 0,1 \cdot k_p$ [8]), D – двойная связь в подвешенной группе, A – аллильный радикал. Участие первичного радикала в реакциях обрыва в модели не учитывалось.

Предполагалось, что в реакционной системе отсутствуют какие-либо примеси, способные вступать в реакцию с мономером или радикалом, а стенка модельного реактора является инертными.

Таким образом, в данной модели имитировались следующие реакции (ниже записаны скорости протекания этих реакций в обозначениях, принятых в модели):

реакция распада инициатора:

$$W_i = k_d [I] / 2; \quad (13)$$

k_d – константа скорости распада инициатора, $[I]$ – концентрация инициатора;

реакция роста полимерной цепи:

$$W_p = k_p [R][M]; \quad (14)$$

k_p – константа скорости реакции роста, $[R]$ и $[M]$ – концентрации радикалов и мономера в системе соответственно;

реакция обрыва:

$$W_t = k_t [R][R], \quad (15)$$

k_t – константа скорости реакции роста;

реакция макрорадикала и подвешенной двойной связи:

$$W_{pD} = k_p^D [R][D], \quad (16)$$

k_p^D – константа скорости реакции макрорадикала и подвешенной двойной связи, $[D]$ – концентрация подвешенных двойных связей;

реакция роста «менее активного» радикала:

$$W'_p = 0,1 \cdot k_p [R'][M], \quad (17)$$

$[R']$ – концентрация «менее активных» радикалов в системе;

реакция «менее активного» радикала и подвешенной двойной связи:

$$W'_{pD} = 0,1 \cdot k_p^D [R'][D]; \quad (18)$$

реакция обрыва «менее активного» радикала и макрорадикала

$$W'_t = k'_t [R][R']; \quad (19)$$

реакция обрыва «менее активных» радикалов

$$W''_t = k''_t [R'][R']; \quad (20)$$

деградационная передача цепи на мономер

$$W_{deg} = k_{deg} [R][M]; \quad (21)$$

эффективная передача цепи на мономер

$$W_{eff} = k_{eff} [A][M]. \quad (22)$$

ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ РЕАКЦИОННОЙ СИСТЕМЫ

Реакцию трехмерной полимеризации моделировали на кубической решетке с размером $100 \times 100 \times 100$. Полагали, что мономер и инициатор располагаются между узлами решетки, а узлы решетки свободны. При моделировании реакционного процесса узлы решетки могут занимать звенья цепи полимера, подвешенные двойные связи и радикалы. Повторное посещение занятых узлов было запрещено (эффект исключенного объема).

Имитацию процесса трехмерной радикальной полимеризации воспроизводили $N = 5000$ раз (5000 опытов), и по этому числу опытов находили средние значения параметров. Моделирование полимеризации осуществляли по достижении предельной степени превраще-

ния. Полагали, что модельная длина молекулы мономера l занимает 2 ребра (3 узла), 4 ребра (5 узлов) и 6 ребер (7 узлов). Константа скорости реакции роста цепи была принята для ДАИФ равной $k_p = 200$ л/(моль·с), $k'_p = 20$ л/(моль·с), константа скорости реакции обрыва цепи $k_t = 2,65 \cdot 10^7$ л/(моль·с) (обрыв по механизму рекомбинации радикалов), константа передачи цепи на мономер $k_M = k_{deg} + k_{eff} = 20$ л/(моль·с), константа распада инициатора равна $k_d = 10^{-6} \text{ с}^{-1}$ [2, 4, 6–7]. Инициатором реакционного процесса является перекись бензоила (ПБ) [5].

В реакционной системе, при наличии определенных условий, могут параллельно протекать несколько реакционных процессов, что и было реализовано в данной модели.

Имитация полимеризационного процесса в модели осуществлялась с помощью статистического метода Монте-Карло [1, 8]. Применение данного метода основано на случайном характере протекания элементарных реакций процесса полимеризации. Моделирование кинетики полимеризации включало следующие элементы случайности:

- генерация случайного события, при наступлении которого происходит выбранный тип реакции;
- выбор случайного активного реагента, участвующего в текущей реакции при наступлении события (радикалов, инициатора);
- выбор случайного направления роста радикала;
- выбор случайного направления возможного размещения звена полимерной цепи.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОГО ПРОЦЕССА

Имитирование полимеризационного процесса включает в себя несколько этапов. Схематически процесс представлен на рис. 1.

Этап 1. На этом этапе происходит считывание физико-химических параметров реагентов полимеризационного процесса: μ_1 , ρ_1 для инициатора; μ_M , ρ_M для мономера. Задаются параметры модельного реактора: массовая доля инициатора в системе, T – температура процесса, общее число узлов кубической решетки N_R , время окончания процесса τ . Химические параметры процесса: k_d , k_p , k_t – константы скоростей элементарных реакций. Устанавливается начальное состояние модели на текущее время $t = 0$.

Этап 2. Для имитирования процесса полимеризации необходимо задание определенных физико-химических параметров реагентов. Зная массовое отношение инициатора в системе, не трудно рассчитать число молекул инициатора N_I :

$$N_I = \frac{N_R}{n_I + n_M \frac{\mu_I}{\mu_M} \cdot \frac{m_M}{m_I}}, \quad (23)$$

где N_R – общее число узлов в решетке, μ_1 и μ_M – молярные массы инициатора и мономера [5,9],

$\frac{m_I}{m_M}$ – массовая доля инициатора в реакционной

системе, $n_I = 1$ и $n_M = 3,5,7$ – параметры, характеризующие модельные размеры молекул инициатора и мономера, при имитировании процесса роста на кубической геометрической решетке, узлы которой занимает реагент.

Число молекул мономера N_M в модельном реакторе определяется как:

$$N_M = N_R - N_I. \quad (24)$$

Зная молярный объем реагентов, можно вычислить объем, занимаемый веществом реактора:

$$V_R = V_I V_{\mu I} + V_M V_{\mu M}, \quad (25)$$

где $V_I = \frac{N_I}{N_A}$ и $V_M = \frac{N_M}{N_A}$ – количество вещества инициатора и мономера, N_A – число Авогадро,

$V_{\mu I} = \frac{\mu_I}{\rho_I}$ и $V_{\mu M} = \frac{\mu_M}{\rho_M}$ – молярные объемы инициатора и мономера, ρ_1 и ρ_M – их плотности [5, 9].

Величина объема реактора используется при перерасчете констант химических реакций в безразмерные величины. Константа скорости элементарной реакции численно равна скорости данной реакции при концентрации реагентов 1 моль/л. То есть, при объеме реактора $V_R = 1$ л и соответствующем числе молекул реагентов N_A , скорость реакции составит N_A^2 1/с.

Для реактора объемом V_R перерасчет констант скоростей элементарных реакций выполняется по формуле:

$$k \left[\frac{1}{\text{с}} \right] = \frac{k \left[\frac{\text{л}}{\text{моль} \cdot \text{с}} \right]}{N_A \cdot V_R}. \quad (26)$$



Рис. 1. Схематическое представление модельного процесса полимеризации

Этап 3. В данном блоке рассчитываются скорости имитируемых реакций в системе в размерности [1/с]. Затем определяется элементарное время

$$\Delta t = \frac{1}{\sum_j W_j}, \quad (27)$$

где $\sum_j W_j$ – сумма всех скоростей реакций.

Время Δt определяет интервал, в течение которого система переходит из одного состояния в другое. Предполагается, что за время Δt скорости имитируемых реакций в системе постоянны, возможно только изменение числа реагентов.

Этап 4. Имитация элементарных реакций происходит следующим образом.

Инициирование

Если в системе присутствует инициатор, тогда генерируется случайное число $\xi \in [0, 1)$ такое, что при выполнении условия

$$\xi < \Delta t \cdot W_i, \quad (28)$$

в системе выполняется реакция инициирования и образуется макрорадикал. Инициирование может произойти на мономере или на подвешенной двойной связи. Распад молекулы инициатора происходит в любом из свободных узлов решетки. При этом допускается, что возникающий «первичный активный радикал» (R_0) сразу вступает в реакцию с мономером или подвешенной двойной связью.

Учитывая, что число мономеров и двойных связей в системе все время меняется, моделирование этого процесса происходит согласно следующему алгоритму. При выполнении (28) генерируется новое $\xi \in [0, 1)$ такое, что, если верно

$$\xi < \frac{M}{M + 0,5 \cdot D}, \quad (29)$$

то иницируем макрорадикал с участием мономера, иначе – с подвешенной двойной связью. M и D – число мономеров и двойных связей в системе. Множитель 0,5 предполагает, что вероятность инициирования двойной связи

в 2 раза меньше по сравнению с мономером, стерические условия при этом не учитываются. После выполнения (28) число молекул инициатора уменьшается $I = I - 1$, условия (29) – мономеров уменьшается $M = M - 1$, радикалов увеличивается $R = R + 1$, иначе $D = D - 1$, $R = R + 1$.

Реакция роста. Если в системе присутствуют макрорадикалы $R > 0$, то за время Δt возможны реакции типа $R + M$ и $R + D$. В этом случае генерируются числа $\xi_1 \in [0,1)$ и $\xi_2 \in [0,1)$ такие, что при выполнении условий:

$$\xi_1 < \Delta t \cdot W_p, \quad (30)$$

$$\xi_2 < \Delta t \cdot W_{pD}, \quad (31)$$

происходит реакция роста: выбирается направление возможного размещения молекулы мономера, если же размещение мономерного блока невозможно, то данный радикал является запертым радикалом, при этом в решетке делается соответствующая метка. В случае верного (30), т.е. размещение мономера было найдено, число мономеров уменьшается $M = M - 1$, а при выполнении (31) уменьшается число двойных связей $D = D - 1$ и радикалов $R = R - 1$, в системе образуется «менее активный» радикал R' .

Если в системе есть число радикалов $R' > 0$, то возможны реакции типа $R' + M$ и $R' + D$. В этом случае, как и при имитации реакций (30), (31), генерируются новые числа $\xi_1 \in [0,1)$ и $\xi_2 \in [0,1)$ такие, что при выполнении условий

$$\xi_1 < \Delta t \cdot W'_p, \quad (32)$$

$$\xi_2 < \Delta t \cdot W'_{pD}, \quad (33)$$

происходит реакция роста. В случае верного (32) число мономеров уменьшается $M = M - 1$, радикал R' становится радикалом R ($R' = R' - 1$, $R = R + 1$). А при выполнении (33) – уменьшается число двойных связей $D = D - 1$, количество радикалов в системе остается неизменным.

Реакция обрыва. В случае, если в реакционной системе присутствуют радикалы $R > 1$, $R' > 1$, $R > 0$ и $R' > 0$, возможны следующие типы реакции обрыва $R+R$, $R'+R'$, $R'+R$ полимерной цепи с уничтожением соответствующих радикалов в системе за время Δt . Генерируются случайные числа $\xi_1 \in [0,1)$, $\xi_2 \in [0,1)$, $\xi_3 \in [0,1)$. При выполнении условий

$$\xi_1 < \Delta t \cdot W_t, \quad (34)$$

$$\xi_2 < \Delta t \cdot W''_t, \quad (35)$$

$$\xi_3 < \Delta t \cdot W'_t, \quad (36)$$

проводятся реакции обрыва. В случае верного (34), количество радикалов R в системе уменьшается $R = R - 2$, в случае верного (35) – в системе уменьшаются радикалы R' : $R' = R' - 2$, а при выполнении (36) – в системе уменьшаются оба типа радикалов $R = R - 1$ и $R' = R' - 1$.

Реакция передачи цепи на мономер. В случае, если в системе число радикалов $R > 0$, возможна деградиционная реакция передачи цепи на мономер за время Δt . Для этого генерируется число $\xi \in [0,1)$ такое, что если выполнено условие

$$\xi < \Delta t \cdot W_{deg}, \quad (37)$$

то выполняется реакция деградиционной передачи цепи на мономер. Число радикалов R уменьшается $R = R - 1$, аллильных радикалов A увеличивается $A = A + 1$, число мономеров уменьшается $M = M - 1$.

Если в системе присутствуют аллильные радикалы $A > 0$, то проверяем условие на проведение реакции эффективной передачи цепи на мономер. Генерируем новое $\xi \in [0,1)$:

$$\xi < \Delta t \cdot W_{eff}. \quad (38)$$

При выполнении (38) число аллильных радикалов уменьшается $A = A - 1$, число радикалов R увеличивается $R = R + 1$, число мономеров уменьшается $M = M - 1$.

Этап 5. На этом этапе происходит запись текущего состояния системы в массивы данных.

Этап 6. Проверка условий окончания моделируемого процесса. Процесс прекращается по истечении заданного времени t или пока не будут исчерпаны все активные реагенты (инициатор и радикалы). Если условия не выполнены – текущее время увеличивается на интервал Δt , модель переходит в состояние **Этапа 3**.

На рис. 2 показаны графики зависимостей конверсии от времени.

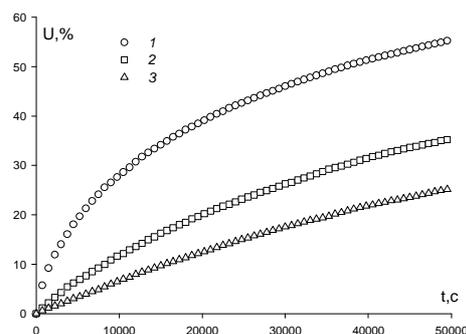


Рис. 2. Зависимость конверсии U от времени t при $l = 3(1)$, $5(2)$ и $7(3)$

Из рисунка видно, что с увеличением модельной длины молекулы мономера l скорость процесса изменяется, и достигаются меньшие значения конверсии, поскольку возрастает доля узлов, занятых неактивной частью молекул, т. е. проявляется концентрационный эффект.

На рис. 3 представлен вклад реакции передачи цепи на мономер на процесс полимеризации. Реакция передачи цепи на мономер приводит к крайне низким скоростям полимеризации.

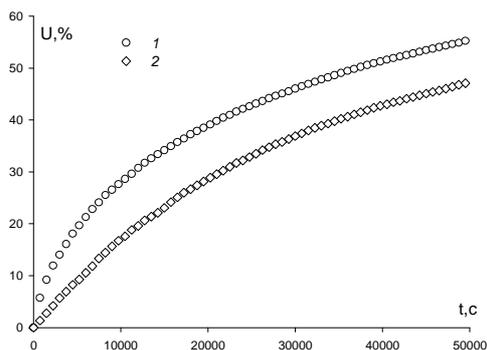


Рис. 3. Зависимость конверсии U от времени t при $l=3$ без учета реакции передачи цепи на мономер (1) и с учетом реакции передачи цепи на мономер (2)

ВЫВОДЫ

Разработанная модель и алгоритм выполнения численного эксперимента, основанные на статистическом методе Монте-Карло, позволяют имитировать кинетику свободно-радикальной трехмерной полимеризации олигоаллилпроизводных мономеров. Данная модель позволяет снимать показания реакционной системы в любой момент времени, следить за изменением числа реагентов, что невозможно измерить в реальных экспериментальных условиях. В ходе моделирования полимеризации модель позволяет варьировать исходные параметры системы и отследить степень их влияния на динамику процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Сивергин, Ю. М.** Синтез и свойства олигоэфир(мет)акрилатов / Ю. М. Сивергин, С. М. Усманов. М.: Химия, 2000.
2. **Володина, В. И.** Полимеризация аллиловых соединений / В. И. Володина, А. И. Тарасова, С.С. Спаский // Успехи химии. 1970. Т.39. С. 276–303.
3. **Кабанов, В. А.** Комплексно-радикальная полимеризация / В. А. Кабанов, В. П. Зубов, Ю.Д. Семчиков М.: Химия. 1987. 256 с.
4. **Воробьева, А. И.** Аллиловые соединения в реакциях радикальной полимеризации

/А. И.Воробьева, Ю.А. Прочухан, Ю.Б. Монаков // Высокомолекулярные соединения, С, 2003, Т. 45, №12, С. 2118–2136.

5. **Берлин, А. А.** Исследование разветвленного полимера диаллилизфталата / А. А. Берлин, Л. А. Сухарева, С. М. Киреева [и др.] // Высокомолекулярные соединения. 1979. Т. 21. С. 172–175.

6. **Hace, I.** Comparison of two algorithms for calculation of the apparent rate constant in the kinetic modelling of diallyl terephthalate bulk polymerization / I. Hace // E-POLYMERS. 2005. № 40

7. **Hace, I.** Kinetics and modeling of the diffusion-controlled diallyl terephthalate polymerization / I. Hace, J. Golob, M. Z. Krajnc // Polymer engineering and science. 2004. Vol. 44, № 10. P. 205–218.

8. **Сивергин, Ю. М.** Моделирование образования единичного трехмерного структурного элемента в свободно-радикальной полимеризации / Ю. М. Сивергин, Р.Р. Исмаилов, Ф.Р. Гайсин [и др.] // Высокомолекулярные соединения. 2008. Т. 50, № 1. С.111–119.

9. **Сивергин, Ю. М.** Кинетика свободно-радикальной полимеризации олигоэфиракрилатов. Стадия роста / Ю. М. Сивергин, С. М. Киреева, И. Н. Гришина // Пластические массы. 1999. № 11. С. 18–20.

ОБ АВТОРАХ



Исмаилов Рауф Равильевич, асп. той же каф. Дипл. спец. по информ. и англ. яз (БирГПИ, 2004). Работает над дис. по моделю процесса трехмерн. свободно-радикальн. полимеризации с помощью метода Монте-Карло.



Шакирьянов Эдуард Данилович, доц. той же каф. Канд. физ.-мат. наук (ИФМК, 2003). Иссл. в обл. некорректн. задач, релаксац. спектроскопии, мат. моделир-я.



Усманов Салават Мударисович, проф., зав. каф. мат. моделир. и инф. систем. Д-р физ.-мат.наук (БашГУ, 1996). Иссл. в обл. механизмов ядерн., магнитн. и диэлектрич. релаксаций в олигомер-полимерных системах.