

**УДК 535.34**

**Віктор Данчук, Анатолій Кравчук**

Національний транспортний університет, Україна

**ФІЗИЧНІ ОСНОВИ ФОРМУВАННЯ ТЕРМОРЕОЛОГІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ  
БІТУМНИХ СУМІШЕЙ З НАНОРОЗМІРНИМИ ПОЛІМЕРНИМИ  
ВУГЛЕВОДНЕВИМИ ПЛАСТИФІКАТОРАМИ**

**Viktor Danchuk, Anatoliy Kravchuk**

**PHYSICAL BASIS OF TERMOREOLOGICAL PROPERTIES FOR BITUMEN  
MIXTURES WITH NANOSCALE POLYMERIC HYDROCARBON PLASTICIZER**

За допомогою методів адсорбційної спектроскопії та рентгеноструктурного аналізу проведено комплекс досліджень структурно-динамічних властивостей, природи взаємодії та структурних фазових переходів в модельних компонентах бітумних композитів з полімерними нанорозмірними пластифікаторами на основі вуглеводних (аліфатичних) сполук (воски, сособіт, редісет, тощо).

Ідея досліджень базується на раніше виявлених авторами методом ІЧ спектроскопії ефектів міжмолекулярної взаємодії та динаміки молекул в кристалах гомологічних рядів аліфатичних сполук (n-парафінів,  $\alpha$ -олефінів тощо). Тут, зокрема, спостерігається температурна залежність положення максимумів частот спектральних смуг давидовських компонентів резонансного розщеплення внутрішньо-молекулярних коливань (ВМК), яка приводить до збігу цих компонентів в області фазового переходу I роду “ порядок - орієнтаційна неупорядкованість “ при температурах на 5 – 10 °С нижчих від температури плавлення цих сполук.

В даній роботі на прикладі n-парафінів, як одного з модельних компонентів бітумних композитів, запропоновано механізм, що адекватно описує виявлений ефект. Цей механізм пов'язаний із затуханням внутрішньо-молекулярних коливальних екситонів у кристалі при їхній взаємодії з орієнтаційними дефектами ґратки, які виникають внаслідок збудження лібраційно - обертальних ступенів свободи органічних молекул при переході кристалу в зазначену ротаційну фазу.

В рамках розвинутих теоретичних уявлень про характер взаємодії в конденсованих середовищах в області фазового переходу I роду розроблено алгоритми та проведено комп'ютерне моделювання температурних структурно-динамічних перетворень в таких модельних сполуках. Визначено ряд механізмів, що обумовлюють реологічні властивості бітумів. Ці механізми пов'язані з температурними переходами аліфатичних компонентів бітумів у ротаційну (пластичну) фазу - «орієнтаційне плавлення» - ще при температурах, нижчих за їх температуру позиційного плавлення. При такому переході відбувається різка зміна характеру руху молекул у вузлах кристалічної ґратки: молекули. Тут, внаслідок теплового збудження вже здійснюються конформаційні, лібраційні та обертальні рухи. Це приводить до різких (нелінійних) змін структурно-механічних властивостей аліфатичних сполук - зокрема різкого, на декілька порядків зменшення їхньої в'язкості, навіть при температурах, нижчих за температуру плавлення. Введення вуглеводневих наномодифікаторів у бітум, за рахунок утворення певних хімічних зв'язків між наночастинками та молекулами бітумів, призводить до збільшення діапазону температур існування орієнтаційної фази, а значить і до збільшення інтервалу температур оптимальних реологічних властивостей бітумів та деформованості бітумів аж до температур нижче за нуль.