

УДК 539.2

ВЛИЯНИЕ ЖЁСТКОСТИ ЦЕПЕЙ НА ВЕРТИКАЛЬНУЮ СЕГРЕГАЦИЮ СМЕШАННЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЩЁТОК В СЕЛЕКТИВНОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

Лукиев И. В. (федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»)

Научный руководитель – доцент центра химической инженерии, Ситникова В. Е.

(федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»);

Настоящая работа направлена на изучение влияния термодинамической жёсткости на вертикальную сегрегацию смешанной полимерной щётки в селективном растворителе, так как во многих прошлых работах авторы при создании моделей делали допущение, что оба полимера смешанной щётки имеют одинаковую жёсткость полимерных цепей.

Введение. Термин «умные полимерные покрытия» применяется для полимерных материалов, способных не просто модифицировать поверхности, а динамически менять свои свойства в зависимости от окружающей среды: за счет изменения кислотности [1], температуры [2], электрического [3] или магнитного [4] полей и т.д. Создание «умных» материалов на основе смешанных полимерных щёток требует разработки новых теоретических моделей и проведения моделирования для установления однозначной связи между химическими и физическими свойствами на макро- и микроуровнях. Целью настоящей работы является изучение влияния термодинамической жёсткости на вертикальную сегрегацию смешанной полимерной щётки в селективном растворителе.

Основная часть. Изменение сродства полимер-растворитель приводит к возникновению фазовой сегрегации. Для смешанных полимерных щёток в селективном растворителе характерна вертикальная сегрегация, в которой один компонент находится вблизи поверхности прививки, а другой - растягивается и располагается на периферии. В рамках крупнозернистого решеточной модели была рассмотрена смешанная полимерная щётка, состоящая из термочувствительных цепей разной длины и жесткости. Цепи типа А были сольвофильны к растворителю, а цепи типа В завесили от селективности растворителя. Селективность растворителя при этом варьировалась за счет изменения параметра Флори-Хаггинса. В качестве инструмента исследования применялся одноградиентный численный метод Схойтенса-Флира. За точку сегрегационного перехода принималось состояние системы, при котором первые моменты концевых звеньев типа А и В были равны.

Выводы. Методом самосогласованного поля рассмотрена структура смешанной щётки, состоящей из двух типов макромолекул А и В, имеющих разное сродство к растворителю (χ) и разные параметры жёсткости. Показано, что с увеличением χ происходит переход от исходной двухслойной структуры (цепи типа А находятся вблизи поверхности прививки, а цепи типа В - на периферии) к аверсной двухслойной. Определено влияние жёсткости (ρ) на точку перехода χ^* для случаев: 1) для цепей с одинаковой жёсткостью χ^* уменьшается с ростом жёсткости обеих цепей; 2) ρ варьируется только для цепей типа В: увеличение ρ для чувствительных цепей приводит к увеличению χ^* . Увеличение ρ делает полимерную щётку более чувствительной если: 1) щётка с низкой плотностью прививки и разной ρ полимерных цепей; 2) щётка с высокой плотностью прививки и одинаковыми параметрами ρ .

Список использованных источников:

1. Dolatkhan A.; Wilson L. Magnetite. Polymer Brush Nanocomposites with Switchable Uptake Behavior Toward Methylene Blue // ACS Appl. Mater. Interfaces 2016. Vol. 8. P. 5595-5607.

2. He G.L., Merlitz H., Sommer J., Wu C. Microphase Separation of Mixed Binary Polymer Brushes at Different Temperatures // *Macromolecules*. 2009. Vol. 42. P. 7194-7202.
3. Tomczykowa M., Plonska-Brzezinska M.E. Conducting Polymers, Hydrogels and Their Composites: Preparation, Properties and Bioapplications // *Polymers*. 2019. Vol. 11. P. 350.
4. Zakharchenko A., Guz N., Laradji A., Katz, E., Minko S. Magnetic field remotely controlled selective biocatalysis // *Nat. Catal.* 2018. Vol. 1. P. 73-81.