

УДК 541.12.01/.017.3:544.344.015.22

Конфирмационные свойства амфифильных гребнеобразных блок-сополимеров

Добровольский С.К. (ИТМО)

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Борисов О.В. (ИТМО)

Введение. Гребнеобразные блок-сополимеры представляют собой разветвленные полимеры с длинной линейной основной цепью и плотно привитыми линейными боковыми цепями. Современные технологии позволяют в широком интервале варьировать архитектуру гребнеобразных полимеров. Может подбираться различная химическая природа мономерных звеньев, а также степени полимеризации основной и боковых цепей. Это позволяет создавать полимерные материалы с уникальными реологическими, механическими, оптическими и/или диэлектрическими свойствами. Расплавы гребнеобразных блок-сополимеров с несовместимыми блоками представляют собой микрофазные структуры, которые могут использоваться в качестве «сухих» гелей, имитирующих ткани организма, и микропористых материалов для создания наномембран. Как с практической, так и с фундаментальной точки зрения важно понимать, как морфология расплавов и конформационные свойства гребнеобразных блок-сополимеров связаны с их молекулярной архитектурой. Целью данной работы являлось проведение компьютерного моделирования систем гребнеобразных макромолекул для построения фазовой диаграммы надмолекулярных структур их расплавов.

Основная часть. Рассматривались расплавы гребнеобразных блок-сополимеров, в которой в качестве несовместимых блоков выступали основная и боковые цепи. Несовместимость блоков задавалась моделью с помощью параметра Флори-Хаггенса. Использовался метод диссипативной динамики, готовые и разработанные программные пакеты для исследования зависимости упорядоченных регулярных структур в расплаве от отношения длины боковой цепи к длине спейсера при изменении аффиности звеньев основной и боковых цепей.

Моделирование проводилось в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Размер ячейки моделирования подбирались таким образом, чтобы могла наблюдаться периодически регулярная укладка макромолекул. Для того, чтобы системы достигали состояния равновесия (минимума потенциальной энергии), проводилось длительное моделирование. После стадии уравнивания образующиеся микроструктуры оценивались как визуально, так и с помощью рассчитанных структурных характеристик: радиальная функция распределения и статистического структурного фактора мономерных звеньев основной цепи. Выявленные микроструктуры классифицировались на неупорядоченную, ламеллярную, гироидную, цилиндрическую и сферическую фазу. По данным моделирования была построена фазовая диаграмма, ограничивающая данные фазы, в координатах параметра Флори-Хаггенса от отношения степени полимеризации боковой цепи и спейсера. Для оптимизации и автоматизации проведенного моделирования было разработано специальное программное обеспечение.

Выводы. Проведен ряд моделирований и анализ морфологии расплавов гребнеобразных блок-сополимеров. На основе результатов DPD моделирования построена фазовая диаграмма, характеризующая данную морфологию.

Список использованных источников:

1. Shifeng Nian, Baiqiang Huang, Guillaume Freychet, Mikhail Zhernenkov, and LiHeng. Unexpected Folding of Bottlebrush Polymers in Melts. *Cai Macromolecules* 2023 56 (6), 2551-2559, DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.2c02053>
2. Košovan, Peter; Kuldová, Jitka; Limpouchová, Zuzana; Procházka, Karel; Zhulina, Ekaterina B.; Borisov, Oleg V. (2016). *Amphiphilic Graft Copolymers in Selective Solvents: Molecular Dynamics Simulations and Scaling Theory*. ACS Publications. Media.

DOI: <https://doi.org/10.1021/ma900768p.s001>

3. Qingliang Song, Qingshu Dong, Ruiqi Liang, Yazhen Xue, Mingjiang Zhong, and Weihua Li. Hierarchical Self-Assembly of ABC-Type Bottlebrush Copolymers. *Macromolecules* 2023 56 (14), 5470-5481 DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c00440>