

УДК 539.2

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЩЁТОК С БИДИСПЕРСНЫМИ ГРЕБНЕОБРАЗНЫМИ БОКОВЫМИ ЦЕПЯМИ

Лукиев И. В. («Национальный исследовательский университет ИТМО»,
Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИВС)

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, Борисов О. В.
(«Национальный исследовательский университет ИТМО»,
Филиал НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИВС)

Введение. Молекулярные щётки - полимерные системы, состоящие из основной полимерной цепи (остова) и привитых к нему боковых цепей [1], которые могут быть как линейными, так и разветвлёнными. Сложная молекулярная архитектура, электростатические взаимодействия и конформационная подвижность молекулярных щёток затрудняют их исследование и прогнозирование химических, физических и конформационных свойств. Конформационное поведение можно изучить локально с помощью персистентной модели. При достаточно высокой плотности прививки боковых цепей объёмные взаимодействия между ними приводят к существенному растяжению (ужесточению) остова [2]. В таких условиях молекулярная щётка приобретает локальную цилиндрическую симметрию и может лишь плавно радиально изгибаться на масштабах, сопоставимых с размером боковых цепей. Изгибная жёсткость молекулярной щётки в таком случае определяется суммой собственной персистентной длины остова и наведенной персистентной длины, обусловленной влиянием привитых цепей. Цель настоящей работы: исследование зависимости персистентной длины от степени разветвленности блоков привитых бидисперсных гребнеобразных цепей в условиях атермического растворителя.

Основная часть. С помощью численного метода самосогласованного поля Схойтенса-Флира было проведено моделирование молекулярных щёток в условиях атермического растворителя. Предполагалось, что i) остов является «фантомным», то есть не обладает объёмными взаимодействиями, ii) мономерные звенья боковых цепей были одинаковыми по размеру друг с другом и с молекулами растворителя. Каждая боковая цепь состояла из двух блоков: внутреннего и внешнего, где вторичные боковые цепи прививались равномерно на расстоянии m друг от друга. Степень полимеризации боковых цепей во внутреннем и внешнем блоках варьировалась исходя из условия постоянства их суммарной степени полимеризации. Разветвлённость гребнеобразных боковых цепей характеризовалась топологическим коэффициентом η .

Выводы. Проведено моделирование молекулярных щёток с гребнеобразными боковыми цепями. Определено, что в условиях атермического растворителя и постоянства общей степени полимеризации при увеличении разветвленности внешнего блока (длины вторичных боковых цепей во внешнем блоке) гребнеобразных боковых цепей, уменьшается толщина молекулярной щётки. Наведённая персистентная длина при изменении бидисперсности привитых боковых гребнеобразных цепей остаётся практически постоянной.

Список использованных источников:

1. Zhang B., Wepf R., Fischer K., Schmidt M., Besse S. et al. The largest synthetic structure with molecular precision: towards a molecular object // *Angewandte Chemie - International Edition*. 2011. V. 50. N 3. P. 737–740. doi: 10.1002/anie.201005164
2. Sheiko S.S., Sumerlin B.S., Matyjaszewski K. Cylindrical molecular brushes: synthesis, characterization and properties // *Progress in Polymer Science*. 2008. V. 33. N 7. P. 759–785. doi:10.1016/j.progpolymsci.2008.05.001