

**Теория избирательной сорбции низкомолекулярных соединений
гетерополимерными глобулами
Погодин С.Г., Кучанов С.И.**

студент

*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
pogodinsg@polly.phys.msu.ru*

Макромолекула гетерополимера, находящаяся в низкомолекулярном растворителе, может принимать, помимо клубковой, глобулярную конформацию. Избирательная сорбция низкомолекулярных соединений внутрь глобулы приводит к различию составов смеси внутри и вне глобулы. Это явление проявляется, в частности, при радикальной сополимеризации, когда состав мономерной смеси внутри растущей глобулы (которую можно рассматривать как некий микрореактор) зависит от состава растущего макрорадикала. Поскольку, во время роста состав макромолекулы меняется, вместе с ним меняется и состав смеси, сорбированной внутрь микрореактора. Это приводит к образованию макромолекул с градиентом состава вдоль цепи. Синтез таких молекул радикальной сополимеризацией, в отсутствие эффекта избирательной сорбции, не возможен.

Описанные выше явления наблюдаются экспериментально при сополимеризации многих пар мономеров, поэтому актуальна разработка количественной теории для их расчёта. Такая теория построена в работе [1]. В ней отдельно рассмотрены задачи о сорбции мономерной смеси гетерополимерными глобулами и о химической кинетике радикальной сополимеризации с эффектом избирательной сорбции. Первая задача решена в объёмном приближении, для несжимаемых систем, с предположением об однородности образующихся глобул. Вторая задача решена в рамках концевой модели полимеризации. Получены общие формулы для обеих задач, однако, расчётов конкретных систем не проведено.

Цель моей работы – разработка компьютерного обеспечения для расчётов конкретных систем, основанного на использовании результатов статьи [1]. С его помощью рассчитана избирательная сорбция двухкомпонентной смеси макромолекулой бинарного сополимера, находящейся в глобулярном состоянии, для некоторых гипотетических систем. Выявлены системы, в которых переход клубок-глобула, при изменении состава низкомолекулярной смеси в объёме, происходит со скачком плотности глобулы и состава смеси в ней (переход первого рода). В других системах переход происходит без скачка плотности и состава (переход второго рода).

Также, для данных гипотетических систем, рассчитаны характеристики продуктов двухкомпонентной сополимеризации с избирательной сорбцией мономеров в массе (связь среднего состава получаемых макромолекул с их длиной, их весовое композиционное распределение, а также - профили изменения локального состава вдоль цепи). Обнаружены системы, в которых образованные макромолекулы имеют сильный градиент состава вдоль своих цепей.

Полученные результаты позволяют, в ближайшем будущем, перейти к расчёту реальных систем и сравнению предсказаний теории с экспериментом. Так же мы планируем усовершенствовать теорию [1] для учёта возможности образования неоднородных глобул.

Литература

1. S.I. Kuchanov, S. Russo, *Macromolecules*, **1997**, 30, 4511