

УДК 541.64:539.199

П.О.Аникеева (3 курс, каф. БФ), Т.М.Бирштейн, д.ф.-м.н. (ИВС РАН)

ПОВЕДЕНИЕ АМФИФИЛЬНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ ЩЕТКИ В СМЕСИ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Полимерные щетки являются адекватными моделями элементов полимерных систем со сложной архитектурой, таких как мицеллы. В природе такие системы способны образовываться самопроизвольно. В этой же работе будут рассматриваться полимерные щетки, полученные химическим путем.

Целью настоящей работы явилось теоретическое исследование поведения амфифильной (способной растворяться как в полярных, так и неполярных растворителях) гомополимерной щетки, помещенной в смесь полярного и неполярного растворителей. Модель полимерной щетки – это матрица с пришитыми к ней полимерными цепями длиной N мономерных единиц размером a , плотность пришивки $1/\sigma$. Она погружена в смесь несмешивающихся растворителей, основного растворителя A и примеси B . Взаимодействие полимера с растворителями и растворителей между собой описывается параметрами Флори-Хаггинса [1].

Для решения данной задачи использовалась модель – "ящика", в которой концы полимерных цепей считаются закрепленными, т.е. плотность полимера распределена равномерно по его длине. Для этой системы решались уравнения равновесия, минимизировалась свободная энергия полимера [2].

Была найдена равновесная зависимость полимера от концентрации минорного растворителя. Оказалось, что градиент свободной энергии вблизи минимума сонаправлен с касательной к равновесной кривой в соответствующей точке. Было также показано, что существует некий состав растворителя вне щетки, при котором состав растворителя внутри щетки не будет меняться при изменении плотности полимера. Оказалось также, что при увеличении доли минорного растворителя вне щетки зависимость плотности полимера от состава растворителя внутри него имеет разрыв, и при уменьшении плотности полимера происходит фазовый переход.

В настоящее время решается аналогичная задача с использованием другой модели "двойного ящика" т.к. было показано, что плотность полимера заметно увеличивается к свободным концам. Уже получены некоторые результаты.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Flory, P. "Principles of Polymer Chemistry" Coronell University Press: Ithaca, NY, 1953.
2. Т.М. Birstein, E.B. Zhulina, A.A. Mercurieva. "Polymer Brush in a Mixture of Incompartible Liquids". Macromolecules 2000, 9, 47-55.