

Целью данной работы было изучение межмолекулярного взаимодействия нанодисперсных частиц оксида циркония с полимерами: поливинилбутиралем, поливинилацетатом и поливиниловым спиртом.

В ходе работы получены пленки полимеров, содержащие различные количества нанопорошка методом полива из раствора. Методом изотермической калориметрии измерены энтальпии растворения композиций в этиловом спирте и воде, с использованием термохимического цикла Гесса рассчитаны энтальпии взаимодействия частиц оксида циркония с полимерными матрицами. Результаты обсуждены с учетом структурных особенностей полимерных матриц и их химической природы. Проведены физико-механические испытания пленок, измерены значения разрывного напряжения.

ИЗУЧЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ РАСТЯЖЕНИЯ ПОЛИМЕРНОЙ ГЛОБУЛЫ ЗА КОНЦЫ ЦЕПИ

Долгова Т.Н., Павлов А.С.

Тверской государственный университет

Полимеры представляют собой важный класс веществ, окружающих нас. Благодаря своим необычным свойствам они находят широкое применение в химии, физике, биологии, медицине, технологии, где они используются в элементах памяти и других устройствах цифровой техники. Более того, процессы самосборки белковых молекул лежат в основе процессов жизнедеятельности биологических систем и изучаются уже на протяжении нескольких лет. Однако, несмотря на достигнутые успехи, попытки получения нативной белковой структуры оказались неудачными.

В связи с этим возникла задача – понять механизм самосборки белковых систем путем постепенного растяжения полимерной цепочки из глобулярного состояния за ее концевые атомы. Поэтому нами методом молекулярной динамики смоделированы процессы растяжения простейших гомополимерных и гетерополимерных цепей.

Рассматривалась простейшая свободно-сочлененная цепь с фиксированными длинами связей. Дальние взаимодействия описывались комбинацией потенциалов Леннарда-Джонса и потенциала типа Юкавы. Рассмотрено поведение сравнительно коротких цепей, имеющих длину до 256 звеньев. Величина энергетического параметра потенциала была задана равной $\epsilon=1.0$, приведенная температура $T=1.0$. При этих условиях устойчивой конформацией макромолекулы является глобулярная (система значительно ниже θ точки).

В процессе моделирования рассчитывались следующие характеристики цепи: компоненты тензора инерции, квадрат радиуса инерции, квадрат расстояния между концами цепи и спэны. Приложенная к концевым атомам сила является параметром расчета. Растяжения макромолекулы в состоянии рыхлого клубка подчиняется гуковскому закону и связано с потерей энтропии при растяжении. Анализ результатов моделирования показал, что можно выделить несколько режимов растяжения цепи, в зависимости от величины приложенной силы.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 04-03-32185).

ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗВЕНЬЕВ ГЕТЕРОЦЕПНОГО ПОЛИМЕРА НА УСЛОВИЯ ПЕРЕХОДА КЛУБОК - ГЛОБУЛА

Явина И.В., Никитина М.Е., Павлов А.С.

Тверской государственной университет

Целью данной работы было изучение влияния статистики распределения звеньев в двухбуквенном гетероцепном полимере на особенности перехода клубок – глобула. Несмотря на значительные успехи, достигнутые в исследовании перехода клубок – глобула, в ранних работах имеются и серьезные недостатки. Прежде всего, это короткие цепи, исследуемые методами имитационного моделирования, при этом в образующейся глобуле практически все звенья являются поверхностными. Кроме того обычно исследуется переход *клубок – рыхлая глобула*, т.е. система находится вблизи от θ - точки, хотя и ниже ее, а обычно используемая при этом система потенциалов, когда взаимодействие звеньев одного типа (сорт *A*) носит характер сильного притяжения, а другой тип атомов (сорт *B*) – стерическое отталкивание, перекрестное взаимодействие *A – B* носит, обычно, также характер стерического отталкивания.

В представленной работе расчеты проводились для молекул длиной $N = 1024$ мономерных звеньев. Моделировалась отдельная цепочка без периодических граничных условий. Использовалась модель свободносочлененной цепи с объемными эффектами, состоящая из разнородных звеньев сортов *A* и *B*, распределенных регулярно вдоль цепи. Длины блоков разнородных мономеров одинаковы и варьировались от 1 до 512 (выбиралась из ряда 2^n).

Особенностью модели используемой в работе является, то что, оба типа блоков в гетерополимере являются гидрофобными. Дальние взаимодействия описывались потенциалом Леннарда-Джонса $U(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6]$. Значение энергетического параметра ε для взаимодействий типа *A – A*, было выбрано равным 1,0, для взаимо-