

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ВИНИЛОВЫХ МОНОМЕРОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Осипенко О.Н., Щербина Л.А.

Могилевский государственный университет продовольствия
г. Могилев, Беларусь

Основными путями получения синтетических полимеров являются реакции полимеризации и поликонденсации. Радикальная полимеризация виниловых мономеров достаточно хорошо изучена. Несомненно, одним из наиболее эффективных путей модификации свойств высокомолекулярных соединений является сополимеризация двух и большего количества сомономеров. Сочетая в одной макромолекуле мономерные звенья различной структуры, можно создавать материалы с заранее заданным комплексом свойств.

Способность различных виниловых мономеров к полимеризации и сополимеризации определяется стерическими факторами (способностью заместителей экранировать двойную связь) и степенью поляризации двойной связи. Множество научных трудов посвящено изучению связи строения мономеров с их реакционной способностью [1-2]. Но экспериментальный опыт указывает на то, что реакционная способность мономеров в реакциях сополимеризации существенно отличается от значений этого показателя при гомополимеризации. Поэтому важной задачей при изучении полимеров является прогнозирование реакционной способности мономеров для направленного регулирования свойства различных материалов на их основе. К сожалению, пока не существует эффективных теоретических подходов к априорному анализу относительной реакционной способности виниловых мономеров в реакциях сополимеризации. Даже широко используемые для расчетов полуэмпирические методы, основанные на экспериментальных данных, зачастую дают неверный результат.

Задачей данного исследования является определение критериев, которые могут быть эффективно использованы при априорном анализе относительной реакционной способности мономеров на основе результатов квантово-химического анализа структуры и стабильности промежуточных продуктов и переходных состояний. Кроме того, следует иметь в виду, что исходные вещества и продукты реакции находятся в окружении молекул растворителя и (или) других веществ.

Проведенный анализ современных методов компьютерного молекулярного моделирования показал, что имеющиеся для квантово-химических расчетов программные продукты – это лишь набор инструментов для выполнения вычислительного эксперимента по усмотрению исследователя. Поэтому на первом этапе выполнения поставленной задачи предлагается изучить квантово-химические модели структуры исходных мономеров, концевых мономерных звеньев растущих макрорадикалов и влияние на них окружающей среды, состоящей из молекул свободного мономера и растворителя.

Литература

1 Аскадский А.А., Кондращенко В.Н. Компьютерное материаловедение полимеров. – М.: Научный мир, 1999, 543 с.

2 Щербина Л.А., Геллер Б.Э., Геллер А.А. Априорная оценка некоторых физико-химических свойств пленко- и волокнообразующих полимеров. – Могилев: УО "МГУП", 2008. – 136 с.