

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРИ ПРОГНОЗИРОВАНИИ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ВИНИЛОВЫХ МОНОМЕРОВ

Осипенко О.Н.

Научный руководитель – Щербина Л.А, к.т.н., доцент
Могилевский государственный университет продовольствия
г. Могилев, Республика Беларусь

Полимеры являются основой существования живой материи и имеют важнейшее значение в жизнедеятельности человечества. Синтетические полимеры могут быть получены на основе виниловых мономеров. Такие полимеры занимают одну из лидирующих позиций в структуре используемых человеком материалов. Немало научных работ посвящено теоретическим и практическим аспектам получения полимеров методом цепной полимеризации. Синтезируемые при этом гомополимеры, как правило, не отвечают всем необходимым требованиям. Наиболее эффективным приемом для направленной модификации свойств полимеров является сополимеризация нескольких мономеров.

Накопленные многолетней экспериментальной практикой данные показывают, что относительные реакционные способности мономеров в реакциях гомополимеризации и сополимеризации существенно различаются. Многочисленные научные публикации посвящены установлению закономерностей, связанных с влиянием строения мономеров: на их реакционную способность, скорость роста полимерной цепи, свойства высокомолекулярных соединений. Тем не менее, пока не предложено теоретических подходов к априорному анализу относительной реакционной способности виниловых мономеров в процессах сополимеризации. В настоящее время эти показатели могут быть определены только экспериментально. Предложенные не многочисленные полуэмпирические методы также основываются на экспериментальных данных. Для анализа структуры и термодинамических функций достаточно простых по строению соединений в состоянии газа весьма активно используются квантово-химические расчеты. Однако для понимания сложных процессов важно получить информацию о поведении не индивидуальных молекул, а молекулярных ансамблей. В основе современной квантовой химии лежит уравнение Шредингера для стационарных состояний. В релятивистской области уравнение Шредингера заменяется более сложным релятивистским уравнением Дирака для атомов и молекул. Сейчас методами квантовой химии можно делать достаточно надежные расчеты лишь для молекулярных систем с числом атомов до одной-двух сотен. Этого явно недостаточно для предсказания коллективных свойств или характеристик даже отдельно взятых макромолекул. Кроме того, следует иметь в виду, что виниловые макрорадикалы всегда находятся в окружении плотной среды, состоящей из низкомолекулярного растворителя, мономеров, растущих радикалов, макромолекул и других частиц. Это окружение также необходимо принимать во внимание. Развитие и использование компьютерных технологий оказывает заметную поддержку экспериментальным работам и вычислительным экспериментам, позволяя существенно снизить временные и материальные затраты на изучение сложных процессов образования макромолекул. В целом, несмотря на бурный прогресс методов проведения компьютерного эксперимента, анализ изучаемой проблемы показал, что для решения поставленной в данной работе задачи не избежать использования тех или иных упрощающих допущений.