

## Методы и приложения статистической физики макромолекул

*Лектор: к.ф.-м.н., доцент Говорун Елена Николаевна*

### Аннотация курса

В курсе обучающиеся овладевают применением различных методов статистической физики макромолекул (в частности, метода скейлинговых оценок, метода самосогласованного поля) для предсказания свойств полимерных систем, описываются основные свойства многих полимерных систем.

### Структура и содержание дисциплины

- Относительная молекулярная масса. Молекулярно-массовое распределение (ММР) - численное и массовое; среднечисленная, среднемассовая, z-средняя, средневязкостная молекулярная масса и степень полимеризации. Экспериментальные методы определения молекулярной массы полимера. Кинетически обоснованные ММР.
- Свободная энергия полимерного раствора; энергия взаимодействия, связь параметра Флори-Хаггинса и поляризации мономерных звеньев. Обменный химический потенциал. Устойчивость однородного состояния раствора полидисперсных полимеров.
- Смесь полимеров: расчет поверхностного натяжения на границе раздела и толщины переходной области в приближении теории самосогласованного поля (ССП). Обобщение на случай разных длин статистических сегментов. Экспериментальная зависимость поверхностного натяжения от длин макромолекул. Поверхностное натяжение (в приближении СП) с учетом распределения концов макромолекулы.
- Полимерная глобула. Свободная энергия в объемном приближении, поверхностное натяжение. Выражение для поверхностного натяжения при описании объемных взаимодействий в вириальном разложении. Переход клубок-глобула.
- Слой полимерных цепей, прикрепленных концом к плоской поверхности в расплаве химически идентичных цепей: модель Александера – де Жена. Перекрывающиеся и неперекрывающиеся цепи. Зависимость толщины и плотности слоя от плотности пришивки и длины цепей.
- Слой полимерных цепей, прикрепленных концом к плоской поверхности, со свободным вторым концом в растворителе: метод самосогласованного поля. Концентрация мономерных звеньев.
- Полуразбавленный раствор. Блобы. Слой полимерных цепей, прикрепленных концами к плоской поверхности в хорошем растворителе (модель Александера – де Жена). Зависимость толщины и плотности слоя от плотности пришивки и длины цепей.
- Слой полимерных цепей, прикрепленных концами к сферической частице, в хорошем растворителе. Расчет толщины слоя методом скейлинга.
- Стабилизация эмульсии в расплаве смеси гомополимеров А и В с помощью диблок-сополимера, адсорбированного на поверхности раздела. Уравнение для равновесного значения поверхностной плотности цепей диблок-сополимера – связь с размером частиц.

- Свободная энергия гетерополимерной системы. Понятие о замороженном беспорядке. Метод реплик.
- Адсорбция идеальной полимерной цепи на притягивающей плоскости (скейлинговый подход и решение уравнения Эдвардса). Зависимость концентрации мономерных звеньев от расстояния до плоскости. Функция Грина адсорбированной цепи.
- Адсорбция макромолекулы на плоскости в хорошем растворителе (скейлинговый подход и решение уравнения Эдвардса). Зависимость концентрации мономерных звеньев от расстояния до плоскости. Поверхностная плотность адсорбированного полимера.
- Жесткоцепные полимеры. Типы фаз жидких кристаллов. Свободная энергия раствора жестких стержней. Фазовый переход из изотропной в нематическую фазу (подходы Онсагера и Флори).
- Модели динамики полимерной цепи в растворе и расплаве. Модель Рауза: уравнение движения звена, его решение в континуальном пределе. Вычисление коэффициента самодиффузии цепи. Максимальное время релаксации цепи. Скейлинговая оценка и точное вычисление зависимости среднеквадратичного смещения звена от времени.
- Модели динамики полимерной цепи в растворе и расплаве. Модель Зимма. Уравнение движения звена, определение тензора Озеена. Уравнение Зимма и его приближенное решение для цепи в  $\theta$ -растворителе. Максимальное время релаксации. Коэффициент самодиффузии цепи. Гидродинамический радиус цепи. Обобщение скейлинговых результатов на клубок с исключенным объемом.
- Динамика флуктуаций концентрации в растворах (диаграмма состояний). Динамический структурный фактор. Динамический структурный фактор цепи в модели Рауза. Характерное время релаксации флуктуаций при их диффузионном рассасывании. Коэффициент кооперативной диффузии.
- Модель рептаций. Скейлинговые оценки для контурной длины, времени выползания из трубки, коэффициента самодиффузии в расплаве. Релаксация вектора, соединяющего концы примитивного пути. Среднеквадратичное смещение звена. Режимы рептационного движения макромолекулы.
- Молекулярная теория вязкоупругости. Релаксационный модуль упругости. Связь напряжений и деформаций в сдвиговом потоке (различные виды деформаций). Модуль накопления и модуль потерь. Стационарная вязкость и стационарная податливость. Характеристическая вязкость.
- Микроскопическое представление тензора напряжений. Релаксационный модуль упругости в модели Рауза. Сопоставление теории с экспериментальными данными по стационарной вязкости и податливости.

Рекомендуемая литература:

1. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. “Статистическая физика макромолекул” М.: Наука, 1989. (djvu)
2. С.И. Кучанов А.Р. Хохлов “Лекции по физической химии полимеров” М.:Мир, 2000. (Лекции по физике: <http://polly.phys.msu.ru/ru/education/courses/polymer-intro.html>)
3. П. де Жен “Идеи скейлинга в физике полимеров” М.: Мир, 1982. (djvu)
4. Helfand E., Tagami Y. ”Theory of interface between immiscible polymers” *J. Polym. Sci. B* 1971, 9(10), 741.
5. Ermoshkin A.V.; Semenov A.N. ”Interfacial Tension in Binary Polymer Mixtures” *Macromolecules* 1996, 29(19), 6294-6300.
6. П. де Жен. “Физика жидких кристаллов” М.: Мир, 1977.
7. Чандрасекар С. “Жидкие кристаллы” М.: Мир, 1980.
8. Дои М., Эдвардс С. “Динамическая теория полимеров”. М.: Мир, 1998.