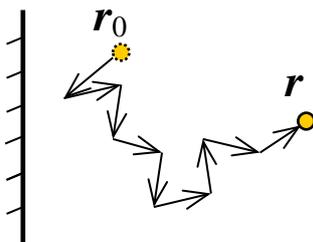


Тема курсовой работы:

Приложение теории случайных блужданий к описанию пространственной структуры полимерных цепей

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Говорун Елена Николаевна

Пространственное расположение полимерной цепи в некоторых случаях похоже на траекторию, которую описывает броуновская частица при случайном блуждании. Температуру, при которой макромолекула в растворителе ведет себя таким образом, называют θ -температурой. При изменении температуры макромолекула может свернуться в плотную глобулу или, наоборот, развернуться (набухший клубок).

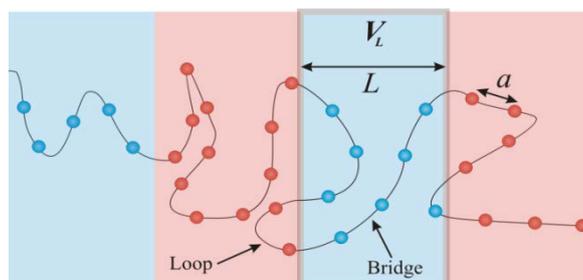


Для математического описания случайных блужданий используются уравнения диффузионного типа, которые могут учитывать (с помощью граничных условий) пространственные ограничения, а также внешнее поле [1]. Уравнение для плотности вероятности $G(\mathbf{r}, n | \mathbf{r}_0)$ (статистической суммы) макромолекулы из n звеньев с началом в точке \mathbf{r}_0 заканчиваться в точке \mathbf{r} имеет вид (векторы обозначены жирным шрифтом):

$$\frac{\partial G(\mathbf{r}, n | \mathbf{r}_0)}{\partial n} = \frac{a^2}{6} \Delta_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}, n | \mathbf{r}_0) - \frac{U}{kT} G(\mathbf{r}, n | \mathbf{r}_0),$$

U – внешнее поле, a – размер звена.

В рамках выполнения курсовой работы предлагается проанализировать зависимость среднеквадратичного размера цепи от числа звеньев для фантомной и нефантомной макромолекулы (для случайного блуждания с самопересечениями и без них), а также познакомиться с гауссовой моделью макромолекулы.



Дополнительно возможно проанализировать распределения длин последовательностей звеньев одного типа, который соответствует определенной пространственной структуре системы, например, гексагонально упакованным цилиндрам в микрофазно расслоенной системе. Результаты исследования можно сравнить с ранее полученными данными, например, для слоистой микроструктуры [2].

Литература

- [1] П.-Ж. де Жен “Идеи скейлинга в физике полимеров”, М.: Мир, 1982. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. “Статистическая физика макромолекул” М.: Наука, 1989.
- [2] Govorun E. N., Gavrilo A. A., Chertovich A. V. “Multiblock copolymers prepared by patterned modification: Analytical theory and computer simulations” // *J. Chem. Phys.*, 2015, **142**(20), 204903.