

Квантово-химическое описание и экспериментальные доказательства микроструктурной неоднородности сополимеров малеинового ангидрида

© Филимошкин Анатолий Георгиевич,¹⁺ Полещук Олег Хемович,^{2*}
Кучевская Александра Сергеевна,¹ Березина Елена Михайловна¹
и Иванов Александр Андреевич¹

¹ Химический факультет. Томский государственный университет.

Пр. Ленина, 36. г. Томск, 634050. Россия. Тел.: (3822) 49-17-21. E-mail: poly@ipc.tsc.ru

² Биолого-химический факультет. Томский государственный педагогический университет.
Ул. Киевская, 60. г. Томск, 634061. Россия.

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: микроструктура, кооперативные реакции, теория функционала плотности, перенос заряда, химическое зондирование.

Аннотация

Микроструктурная неоднородность сополимера винилхлорид-малеиновый ангидрид самопроизвольно формируется в результате таутомеризации исходных повторяющихся звеньев в енольные (*en*) и диенольные (*den*) таутомеры. Звенья *en* и *den* включают молекулярные ансамбли с новой реакционной способностью, благодаря чему возможна разработка метода их деликатного химического зондирования с использованием нуклеофильных реагентов, имеющих аналогичные ансамбли – NaNO₂, NaN₃, ДМФА. Путем неэмпирического квантово-химического моделирования структуры и энергетики таутомеров проведена оценка *a priori* микроструктурной неоднородности макромолекул и проанализировано распределение электронной плотности высших занятых и низшей свободной молекулярных орбиталей в комплексах с переносом заряда. Расчеты подтверждены обширным экспериментальным материалом. Исследована также микроструктурная неоднородность сополимера винилацетат-малеиновый ангидрид – наличие *en* и *den* таутомеров в его звеньях также подтверждено расчетами.