

Оценка фрактальной размерности звездообразных полимеров с разным числом лучей в компьютерном эксперименте

© Сидоренко^{1*} Олег Евгеньевич и Роднянский¹⁺ Денис Александрович

Кафедра высокомолекулярных соединений и коллоидной химии. Химический факультет. Воронежский государственный университет. Университетская пл., 1, Воронеж, 394036. Воронежская обл. Россия.

Тел.: ¹⁾ 8 903 859 9790; ²⁾ 8 920 463 4904. E-mail: ¹⁾ oleg1962@yandex.ru, ²⁾ chthonic96@gmail.com

*Ведущий направление, +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: звездообразные полимеры, фрактальная размерность, молекулярная динамика.

Аннотация

Одной из важных характеристик полимерной молекулы является ее фрактальная размерность. Фракталами называют объекты, хаусдорфова размерность которых дробная и превышает топологическую размерность. Главной отличительной особенностью таких объектов является самоподобие. Фрактальные характеристики полимерных макромолекул во многом определяют химические, физико-химические и физические свойства этих объектов, такие как скейлинговые параметры Марка-Куна-Хаувинка, ударная вязкость, тангенс угла механических потерь и динамический модуль упругости. В настоящий момент детально исследованы фрактальные свойства топологически линейных полимеров, однако фрактальные свойства практически значимых звездообразных полимеров, по-прежнему остаются малоизученными. Вероятно, это связано с тем, что компьютерное моделирование полимерных систем методами классической механики требует длительных расчетов даже на суперкомпьютерах. В этом отношении интересно оценить возможности применения в молекулярном моделировании полимеров относительно простых программных пакетов, таких как NupurChem.

Цель работы заключалась в определении фрактальной размерности 3, 4, 5 и 6-лучевых звездообразных $(-\text{CH}_2-\text{CH}_2-)_n$ полимеров в состоянии минимума потенциальной энергии и в состоянии термодинамического равновесия при постоянной температуре и в оценке целесообразности применения пакета NupurChem для моделирования полимерных молекул методом молекулярной динамики. Для получения конформаций изолированных молекул в состоянии минимума потенциальной энергии проводилась оптимизация геометрии методом сопряженных градиентов в поле MM+. Для приведения макромолекул к состоянию термодинамического равновесия при постоянной температуре проводилось моделирование методом молекулярной динамики в каноническом ансамбле. Для исследуемых полимеров рассчитаны значения фрактальной размерности и вычислены значения критического индекса Флори. Полученные данные подтверждают связь фрактальной размерности с типом конформации макромолекулы.