

Молекулярный дизайн полимеров

Цель работы – ознакомить студентов с методами расчета физических свойств линейных и сетчатых полимеров на основе их химического строения. Методы компьютеризованны и имеется несколько ЭВМ-программ, позволяющих производить расчет физических свойств неограниченного числа полимеров любого химического строения. С этой целью структура повторяющегося звена полимера или повторяющегося фрагмента сетки изображается на экране дисплея, после чего компьютер производит автоматический расчет свыше 120 физических свойств. Помимо физических свойств, предсказывается растворимость полимеров в органических растворителях, их совместимость друг с другом. Выдаются зависимости свойств от молекулярной массы полимера, от степени кристалличности, от микротаكتичности и температуры. Помимо полимеров, студенты осваивают расчеты свойств сополимеров, содержащих до 8 компонентов, и анализируют зависимости свойств от состава.

Вторая часть работы посвящена компьютерному синтезу полимеров с заданными свойствами, интервал которых вводится в компьютер. Молекулярный дизайн заключается в построении таких полимерных структур, которые приводили бы к нужным свойствам в результате их реального синтеза и химической модификации.