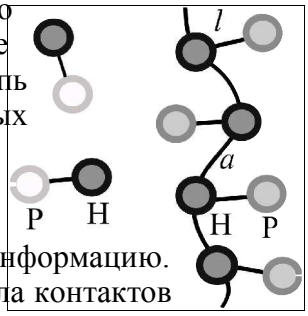
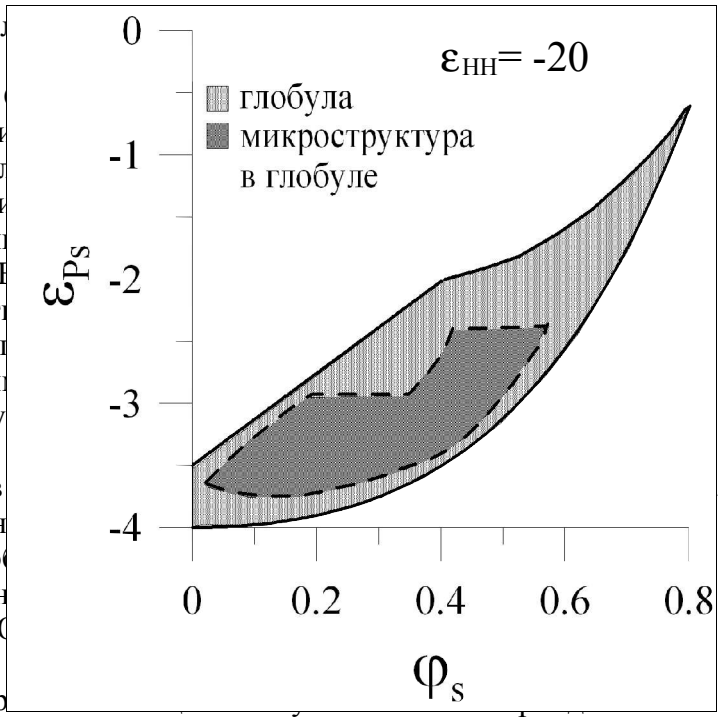
Полимерные глобулы в смешанном растворителе[1]

Ушакова А.С.[2]
аспирантка
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
ushakova@polly.phys.msu.ru

В данной работе теоретически исследуются амфифильные макромолекулы с составными гидрофобно-полярными звеньями в смеси плохого растворителя с амфифильным субстратом, молекулы которого также являются гидрофобно-полярными (см. рис.). Основная цепь макромолекулы построена из гидрофобных H-групп мономерных звеньев, боковые группы являются полярными (P). Ранее объемные и поверхностные свойства глобул таких макромолекул были описаны в растворителе, не содержащем субстрат [1].



Макромолекула в растворе стремится принять глобулярную конформацию. Молекулы субстрата проникают в толщу глобулы для увеличения числа контактов с гидрофобными H-группами макромолекулы, что приводит к избирательной сорбции субстрата и набуханию глобулы.



Мономерные звенья и мол
таким образом, чтобы увеличить
растворителя и H-групп друг с другом.
энергия глобулы в прибли
самосогласованного поля явл
функционалом плотностей компонент, и
распределения молекул субстрата и звен
макромолекулы по ориентациям.
приближении плоской поверхности
рассчитаны поверхностное натяжение
профили объемных долей звеньев поли
субстрата в поверхностном слое с у
ориентации.

Показано, что ориентация звеньев
приводит к уменьшению свободной эн
системы, поверхностного натяжения гло
большей стабильности глобулы по отн
переходу в клубковое состояние.
амфифильных молекул субстрата и
формированию ламеллярной структур
изменяющимися направлениями ориентации и плотностями звеньев полимера и молекул субстрата.

На рисунке представлена диаграмма для микроструктуры в глобуле; $\tilde{s}$ объемная доля субстрата в растворе, $\varepsilon_{Ps}<0$ энергия притяжения полярных групп к молекулам растворителя, $\varepsilon_{HH} < 0$ энергия взаимодействия гидрофобных групп друг с другом. Энергии взаимодействия выражены в единицах $k_B T$.

1. Ushakova A. S., Govorun E. N., Khokhlov A. R ., *J. Phys. Cond. Mat.* 2006, 18(3), 915.

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 06-03-33146.
[2] Автор выражает признательность научному руководителю к. ф.- м. н. Говорун Е.Н.