

Компьютерное моделирование перехода клубок-глобула для реалистичных моделей N-изопропилакриламида и некоторых его сополимеров
Голубовский Д.Н., Иванов В.А., Хохлов А.Р.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия
dng@polly.phys.msu.ru

Целью работы является исследование свойств некоторых конкретных гомополимеров и сополимеров с помощью метода компьютерного моделирования и с использованием моделей, учитывающих реальную химическую структуру макромолекул. В частности, исследуется температура перехода клубок-глобула для одиночной макромолекулы. Объектами исследования являются N-изопропилакриламид (NIPA) и его сополимеры с метакриловой кислотой. Выбор этих полимеров обусловлен тем, что для этих гомополимеров и сополимеров на основе этих мономеров уже имеются экспериментальные данные о температуре перехода, что дает возможность сравнения с результатами компьютерного эксперимента

Моделирование ведется методом молекулярной динамики.

Для сополимеров N-изопропилакриламида и метакриловой кислоты исследуется зависимость температуры перехода от степени блочности.