

## МАТЕМАТИЧНЕ І КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МОЛЕКУЛЯРНО-МАСОВОГО РОЗПОДІЛУ В ЛІНІЙНОЇ ПОЛІКОНДЕНСАЦІЇ

Кондратов С.О., Немоловський В.В., Смотров Є.І.

Філіал Східноукраїнського національного університету імені Володимира Даля (м. Рубіжне),  
kondratov@rune.lg.ua

Незважаючи на прогрес сучасних фізичних методів досліджень, при детальному вивченні складу поліконденсаційних полімерів виникають певні проблеми. Тому розробка методів розрахунків та прогнозування молекулярно-масового розподілу має не тільки теоретичний, але й практичний інтерес.

У нашій роботі за основу розрахунків обрано середню ступень полімеризації ( $\nu$ ), оскільки ця величина легко визначається експериментально. Метою роботи є пошук зв'язку між  $\nu$  і молекулярно-масовим розподілом полімерів, що створюються шляхом незворотної поліконденсації.

У основу математичної моделі покладені такі припущення:

- а) процес поліконденсації перебігає статистично;
- б) кінетика поліконденсації задовольняє принципу Флорі про незалежність реакційної здатності функціональних груп від ступеня полімеризації.

На основі цих припущень розроблено теоретико-ймовірнісну модель поліконденсації – “модель кошику з пластиліновими кульками”. Згідно з цей моделлю процес поліконденсації розглядається, як перерозподіл пластилінових кульок між кошиками. Кожний кошик з порядковим номером  $N$  розглядається, як становище із ступенем полімеризації  $N$ . У окремому елементарному акті відбувається випадковий вибір двох непустих кошиків з номерами  $i$  та  $j$ . З кожного з кошиків вилучають по одній кульці. Вилучені кульки зліплюють у одну велику кульку, яку поміщають у кошик з номером  $i+j$ .

Згідно з моделлю, у початковий момент часу заповненим є тільки кошик з номером 1, що відповідає мономеру.

У описаному процесі виконується закон збереження: загальна кількість молекул-мономерів (вільних і в складі полімерів) є постійною:

$$\sum_{i=1}^m i \cdot N_i = N_1^0 \quad (1)$$

На основі аналізу подій, що відбуваються під час перерозподілу, отримано систему диференціальних рівнянь, що описують зміни з часом кількості кожного з полімерів:

$$\frac{dN_i}{dm} = \frac{\sum_{j=1}^{i-1} N_j \cdot N_{i-j}}{(N_1^0 - m)^2} - \frac{2 \cdot N_i}{(N_1^0 - m)} \quad (2)$$

На основі послідовних рішень цих рівнянь одержано вираз для частки  $p_i$  полімеру зі ступенем полімеризації  $i$  у той час, коли середній ступень полімеризації складає  $\nu$ :

$$p_i = \frac{(\nu - 1)^{i-1}}{\nu^i} \quad (3)$$

Розроблено імітаційну комп'ютерну модель поліконденсації, як Монте-Карловську модель одновимірною клітинного автомату, що реалізує процеси перерозподілу за законом випадку. У процесі моделювання задавали початкову кількість молекул мономерів (100000 – 2000000) і середній ступень полімеризації, який слід було досягнути (2-50) і проводили випадкові випробування до досягнення цієї величини, після цього проводили аналіз молекулярно-масового розподілу. Було встановлено, що результати моделювання є сталими і не залежать статистично значимо від початкової кількості молекул мономеру. При цьому одержаний розподіл добре збігається з результатами, одержаними аналітично по формулі (3). Це свідчить про адекватність клітинно-автоматної моделі і дає потенційну можливість використовувати її у випадках, коли аналітичний вираз отримати неможливо.