

МІЖМОЛЕКУЛЯРНА ВЗАЄМОДІЯ В ПОЛІМЕР-ПОЛІМЕРНИХ КОМПОЗИТАХ

Хамар О. О., Ковальський Я. П., Дутка В. С.

Львівський національний університет імені Івана Франка

вул. Університетська, 1, Львів, 79601, Україна

oleh.khamar@lnu.edu.ua

Полімер-полімерні композити на основі електропровідного полімеру поліаніліну (ПАНІ) та водорозчинних полімерів: полівінілового спирту (ПВС) та поліметакрилової кислоти (ПМАК) мають унікальні властивості, що дозволяє застосовувати їх для одержання хемо- і біосенсорів та різноманітних пристроїв. Важливою їхньою характеристикою є здатність утворювати на різних поверхнях електропровідних плівок.

Термомеханічні дослідження та вивчення рентгенівських спектрів вказують на міжмолекулярну взаємодію між макромолекулами ПАНІ та ПМАК і ПАНІ та ПВС.

Вивчення взаємодії між макромолекулами проведено квантово-хімічним методом. Розрахунки проводились напівемпіричним методом зі застосуванням програми МОРАС2016. Макромолекули ПАНІ, ПВС та ПМАК можуть мати різні конформації, а взаємодія між ними проходить з утворенням міжмолекулярних водневих зв'язків. Довжина та енергія водневих зв'язків за рахунок різних конформацій макромолекул може змінюватись. Модель такого міжмолекулярного фрагменту ПАНІ і ПВС та ПАНІ і ПМАК наведена на рис. 1.

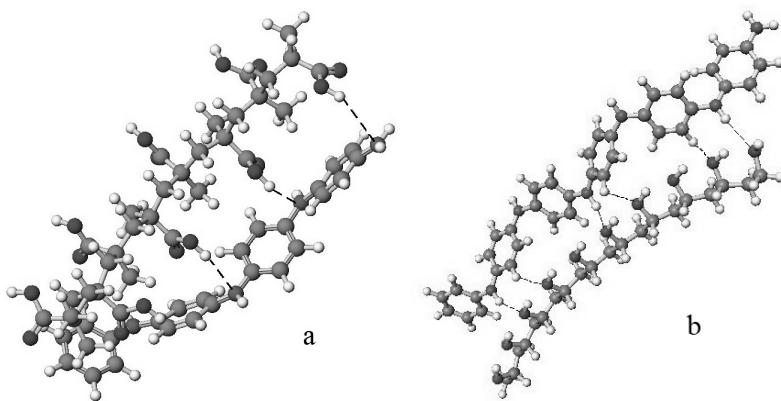


Рис. 1. Моделі композитів ПАНІ-ПМАК – (а) та ПАНІ-ПВС – (б).

На чотири ланки ПМАК і ПАНІ утворюються чотири водневі зв'язки на шість ланок ПВС та ПАНІ утворюється 5–6 водневих зв'язків. Середня енергія одного водневого зв'язку складає 10–13 кДж/моль. Міжмолекулярна взаємодія між компонентами буде впливати на фізико-хімічні властивості полімер-полімерного композиту.