

**МОЛЕКУЛЯРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ КОМПОЗИТІВ НА ОСНОВІ
ПОЛІАНІЛІНУ ТА ПОЛІВІНІЛОВОГО СПИРТУ, ПОЛІМЕТАКРИЛОВОЇ
КИСЛОТИ ТА ПОЛІМЕТИЛМЕТАКРИЛАТУ**

Галечко Г., Ковальський Я., Дутка В.

Львівський національний університет імені Івана Франка
Україна, 79601, Львів, вул. Університетська, 1
yaroslav.kovalskyi@lnu.edu.ua

Електропровідні композити на основі поліаніліну (ПАНІ) та плівкоутворюючих полімерів, а саме: полівінілового спирту (ПВС), поліметакрилової кислоти (ПМАК) та поліметилметакрилату (ПММА), можна успішно використовувати як основу для конструювання хемо- та біосенсорів.

Нами проведено квантово-хімічні розрахунки для композитів ПАНІ-ПВС, ПАНІ-ПМАК та ПАНІ-ПММА. Квантово-хімічні розрахунки проводилися для ПММА (8 ланок), ПВС (8 ланок), ПМАК (8 ланок), ПАНІ (6 ланок) та їх композицій проводили за допомогою програми МОРАС2016 та графічного інтерфейсу WINMOSTAR, використовуючи напівемпіричний метод RM7. Термодинамічні розрахунки моделей проводили з використанням ключового параметру THERMO(290,330,10). Квантово-хімічні дослідження ПАНІ показали, що молекула сильно поляризована і вона може утворювати багато конформацій. Макромолекули ПВС, ПМАК, ПММА також здатні утворювати багато конформаційних станів. При формуванні композиту між макромолекулами ПАНІ та ПВС, ПМАК або ПММА конформації можуть змінюватись, при цьому формується полімер-полімерний композит (ППК). Розраховані значення теплоти утворення для композиту менші від для суми відповідних значень досліджуваних полімерів. Зменшення теплоти утворення пов'язане з утворенням водневих зв'язків між фрагментами ПММА та ПАНІ. Подібні розрахунки ПВС-ПАНІ та ПММК-ПАНІ подібні. Між макромолекулами електропровідного полімеру ПАНІ та плівкоутворюючого полімеру формуються водневі зв'язки. Розраховано енергію та довжини водневих зв'язків. На 6 ланок ПАНІ та 8 ланок ПВС чи ПМАК утворюється 3–4 водневі зв'язки з різною енергією. Вивчено фізико-хімічні параметри ППК. Експериментальні методи рентгенівської спектроскопії, ІЧ-спектроскопії та дослідження термомеханічних властивостей підтверджують факт формування водневих зв'язків у ППК.