

1ДӘРІС ТАҚЫРЫБЫ:

Макромолекулааралық әрекеттесулердің заманауи концепциялары: теория және модельдер

1. Дәрістің мақсаты

- Макромолекулааралық әрекеттесулердің табиғатын, түрлерін және олардың материал қасиеттеріне әсерін түсіндіру;
- Полимер жүйелеріндегі физикалық және химиялық байланыстардың теориялық негіздерін қарастыру;
- Заманауи модельдер мен есептеу әдістері арқылы макромолекулалардың өзара әрекеттесуін сипаттау принциптерін меңгеру.

2. Қол жеткізілетін оқу нәтижелері

Дәріс соңында білім алушы:

1. Макромолекулааралық әрекеттесудің негізгі түрлерін ажырата алады;
2. Полимерлердің физика-химиялық қасиеттерін әрекеттесулер тұрғысынан түсіндіре алады;
3. Макромолекулалық жүйелердің заманауи теориялық модельдерін сипаттай алады;
4. Есептеу химиясы мен молекулалық динамика әдістерін қолдану негізін біледі;
5. Полимерлік материалдардың құрылым–қасиет–функция байланысын түсінеді.

3. Дәріс конспектісі

3.1. Макромолекулааралық әрекеттесудің мәні

Макромолекулааралық әрекеттесулер — бұл полимер тізбектері арасындағы **физикалық немесе химиялық байланыстар**, олар материалдың механикалық, жылулық және ерігіштік қасиеттерін анықтайды.

Негізгі әрекеттесу түрлері:

- **Ван-дер-Ваальс күштері** (дисперсиялық, ориентациялық, индукциялық);
- **Сутектік байланыс**;
- **Электростатикалық әрекеттесулер** (ионды полимерлерде);
- **Гидрофобтық және π – π әрекеттесулер**;
- **Коваленттік және координациялық байланыстар** (желімделген, сшитый полимерлерде).

Бұл әрекеттесулердің табиғаты полимердің құрылымымен (тактикалық, молекулалық масса, полярлық, т.б.) тығыз байланысты.

3.2. Теориялық негіздер

1. Флори–Хаггинс теориясы

Полимер ерітінділерінің термодинамикалық тұрақтылығын сипаттайды.

Негізгі параметр — χ (интеракция параметрі), ол еріткіш пен полимер арасындағы өзара әрекеттесу энергиясын көрсетеді.

Ерітіндінің еркін энергиясы:

$$\Delta G = RT(N_1 \phi_1 \ln \phi_1 + N_2 \phi_2 \ln \phi_2 + \chi \phi_1 \phi_2)$$

2. Рубинштейн–Колпрауш (Reptation) моделі

Бұл модель полимер тізбектерінің қозғалысын шектеулі ортада (торда) сипаттайды. Макромолекула «жылан» тәрізді қозғалады — бұл тұтқырлық пен серпімділік қасиеттерін түсіндіруге мүмкіндік береді.

3. Молекулалық динамика (МД) және Монте-Карло модельдері

- Макромолекулааралық өзара әсерді сандық есептеу және визуализациялау үшін қолданылады.
- МД әдісі арқылы полимер тізбегінің құрылымы, энергиясы, температура әсері зерттеледі.
- Монте-Карло әдісі статистикалық теңгерімдегі конфигурацияларды модельдейді.

4. Су-ерітінді және биополимерлік өзара әсерлер

Биополимерлер (ақуыз, ДНК) су молекулаларымен әрекеттесу арқылы өз кеңістіктік құрылымын тұрақтандырады.

Гидрофобтық әсер мен сутектік байланыстар — табиғи макромолекулааралық әрекеттесудің негізгі қозғаушы күштері.

3.3. Макромолекулааралық әрекеттесулердің әсері

- **Механикалық қасиеттерге:** серпімділік, беріктік, тұтқырлық;
- **Жылулық қасиеттерге:** шынылану температурасы (T_g), балқу температурасы;
- **Ерігіштікке және фазалық күйге:** компатибельділік, микрофазалық бөліну;
- **Морфологияға:** кристалдылық дәрежесі, аморфтық аймақтардың сипаты.

3.4. Заманауи бағыттар мен модельдер

1. **Компьютерлік химия және кванттық механика әдістері (DFT, QM/MM):**
Полимерлік жүйелердегі энергия алмасуын, байланыс беріктігін есептеуге мүмкіндік береді.
2. **Кооперативті әрекеттесу модельдері:**
Бір макромолекуланың күйі көрші тізбектерге әсер етеді (белоктардың бүктелуі, наноккомпозит түзілуі).
3. **Гибридті материалдар теориясы:**
Органикалық және бейорганикалық компоненттердің өзара әрекеттесуін сипаттайды (мысалы, силикат-полимер наноккомпозиттері).
4. **Биомиметикалық модельдер:**
Табиғи жүйелердің әрекеттесу принциптерін синтетикалық полимерлерге қолдану.

4. Қорытынды

Макромолекулааралық әрекеттесулер — полимерлердің құрылымы мен қасиеттерін анықтайтын негізгі фактор.

Заманауи теориялар мен модельдер (Флори–Хаггинс, рептация, молекулалық динамика, DFT) полимер жүйелерінің мінез-құлқын дәл болжауға мүмкіндік береді.

Бұл бағыт материалтану, биополимер химиясы және нанотехнология салаларында жаңа буын функционалды материалдарын жобалаудың теориялық негізін құрайды.

5. Қолданылған әдебиеттер

1. Флори П. *Принципы химии высокомолекулярных соединений*. — М.: Мир, 1972.
2. Рубинштейн М., Колрауш Р. *Polymer Physics*. — Oxford University Press, 2003.
3. de Gennes, P.-G. *Scaling Concepts in Polymer Physics*. — Cornell University Press, 1979.
4. Doi, M., Edwards, S. F. *The Theory of Polymer Dynamics*. — Oxford University Press, 1986.
5. Lodge, T.P., et al. *Physical Chemistry of Polymers*. — CRC Press, 2021.
6. Rubinstein, M., Colby, R. H. *Polymer Physics (2nd ed.)*. — Oxford, 2019.
7. Физическая химия полимеров: Учебник / Под ред. В.А. Каргина. — М.: Химия, 1985.