

ВЕСТНИК

ТВЕРСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

Научный журнал

Основан в 2003 г.

№25, 2011

Зарегистрирован в Верхне-Волжском региональном территориальном
управлении МПТР РФ ПИ № 5-0914 от 31.05.2004 г.

Серия "Химия"

Выпуск 11

2011

Учредитель

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего профессионального
образования «Тверской государственный университет»

Редакционный совет:

Председатель А. В. Белоцерковский

Зам. председателя Г. А. Толстихина

Члены редакционного совета:

Е. Н. Брызгалова, Б. Л. Губман, А. А. Залевская, И. Д. Лельчицкий,
Т. Г. Леонтьева, Д. И. Мамагулашвили, Л. Е. Мошкова, Ю. Г.
Папулов, Б. Б. Педько, А. Я. Рыжов, А. А. Ткаченко, Л. В.
Туманова, А. В. Язенин

Редакционная коллегия серии:

Д-р хим. наук Ю.Г. Папулов (*ответственный редактор*)
акад. РАН, д-р хим. наук Н.С. Зефилов,
чл.-кор. РАН, д-р физ-мат.наук Л.А. Грибов,
д-р хим. наук Л.И. Ворончихина,
д-р хим. наук В.М. Никольский,
канд. хим. наук А.С. Павлов (*ответственный секретарь*)

Адрес редакции:

Россия, 170100, Тверь, ул. Желябова, 33.

Тел. РИУ: (4822) 35-60-63

*Все права защищены. Никакая часть этого издания не может быть
репродуцирована без письменного разрешения издателя.*

СОДЕРЖАНИЕ

Физическая химия

Нератова И.В. Кинетика формирования ламеллярной структуры в сополимерных пленках	3
Алексеева А.Ю., Жеренкова Л.В., Павлов А.С., Сдобняков Н.Ю. Межцепные корреляции в полимерсодержащей ионной жидкости при различных длинах катионного хвоста	11
Папулова Д.Р., Виноградова М.Г., Папулов Ю.Г. Энергия разрыва связей в галогензамещенных метана	19
Чернова Е.М., Орлов М.Ю., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Квантово-механическое исследование электронного строения неразветвленных альдегидов	27
Чернова Е.М., Ситников В.Н., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Влияние карбоксильной группы на электронное строение алкильной цепи	32
Чернова Е.М., Коробейников П.А., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Изучение электронного строения циклических углеводородов	36

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Лапшин С.В., Кулакова Ю.С., Цветкова И.С. Ионные равновесия в растворах стрептомицина и его металлокомплекса с ионами Cu(II)	41
Рясенский С.С. Термодеструкция полианилина	50
Толкачева Л.Н., Симонова М.В., Цветков А.В., Никольский В.М. Комплексообразование ионов Tl^{3+} с комплексонами, производными янтарной кислоты	54

ХРОНИКА

Конференции (на базе ТвГУ)	64
Папулов Ю.Г., Чулкова Л.В. Памятные даты	64
Афанасьев А.Е. Рецензия на книгу Ю.Г. Папулова, Д.Р. Папуловой "Строение молекул и физические свойства". Тверь: ТвГУ, 2011. 280 с.	69
Общие требования и правила оформления рукописей статей для публикации в журнале «Вестник ТвГУ. Серия "Химия " »	71

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 541.64:539.2

КИНЕТИКА ФОРМИРОВАНИЯ ЛАМЕЛЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ В СОПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНКАХ

И.В. Нератова

Тверской государственный университет
кафедра физической химии
Ulm University (Germany), *Department of Polymer science*

Методом диссипативной динамики частиц моделировались расплав и раствор симметричного диблок-сополимера в пленках. Сравнивалась кинетика формирования конечной ламеллярной фазы в расплаве АВ-сополимера и в процессе испарения растворителя из тонкой сополимерной пленки. Показана роль растворителя на формирование структуры в сополимерной пленке при сравнении с самоорганизацией в расплаве АВ-сополимера. Найдено, что растворитель позволяет достичь конечной морфологии, избегая попадания системы в локальные энергетические минимумы, тогда как в расплаве реализуются различные кинетические пути достижения конечной структуры, т.е. вероятность попасть в метастабильное состояние в расплаве велика.

Ключевые слова: диссипативная динамика частиц, пленка диблок-сополимера, ламеллярная фаза, процесс испарения.

Способность блок-сополимеров микрофазно расслаиваться с образованием многообразных структур различной симметрии вызывает как теоретический интерес, так и практический. Практический интерес в большей степени представляют наноразмерные пленки блок-сополимеров, которые находят свое применение в микроэлектронике, в технологии ультрафильтрации, в нанолитографии [1–3]. Современные технологии основаны на получении наноструктурированных пленок главным образом из растворов. К ним относятся метод нанесения раствора полимера на плоскую однородную поверхность (spin-coating) или с помощью нанесения покрытия методом погружения подложки в раствор полимера, который осаждается на ней (dip-coating). При этом важным элементом контроля конечного материала в обеих технологиях оказываются транспортные свойства растворителя в полимерной матрице [4; 5].

В последние годы было выполнено несколько работ по компьютерному моделированию процесса испарения растворителя на примере гомополимерных объектов [6; 7], а также блоксополимерных пленок [8; 9]. В работе [8] был сделан акцент на распределении плотности мультислочного сополимера в пленке, показано существование повышенной