

МОДЕЛЮВАННЯ СТРУКТУРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ПОЛІМЕРНИХ МАТЕРІАЛІВ ЗА ДОПОМОГОЮ ТОПОЛОГІЧНИХ ІНДЕКСІВ

Колесников А.В., к.т.н., доцент
(кафедра хімії та екології)

Одним з сучасних напрямків одержання сполук та матеріалів з оптимальним набором властивостей є методи QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship), оснований на пошуку кількісного співвідношення структура-властивості за допомогою методів математичної статистики. Для опису структури органічних сполук при цьому підході використовуються, зокрема, так звані топологічні індекси – дескриптори молекулярної структури, зокрема, індекси Вінера, Рандіча, Балабана та багато інших, що відносяться до різних класів. Зокрема, індекс Вінера дорівнює половині суми недиагональних елементів матриці відстаней молекулярного графа сполуки. При переносі формалізму структурного опису з органічних сполук на полімерні матеріали, особливо розгалуженої та сітчастої структури, та природні та синтетичні композити, виникають труднощі. Вони мають декілька витоків. По-перше, структура сітчастих полімерів є випадковою, статистично визначеною. Далі, «молекула» у цьому випадку має макроскопічний характер. Таким чином, топологічні індекси для цього випадку мають бути визначені з врахуванням статистичної безкінечної структури полімерів. Одним з шляхів побудови топологічних індексів полімерів є перехід до локальних величин та їх наступному усередненні. Локальні величини індексів відносяться до вершин та ребер молекулярного графа та їх близькому топологічному оточенні. Подібний перехід можна здійснити від кількості фрагментів фіксованої структури до їх загальної частини, нормованої до одиниці. Крім того, у якості вершин можуть бути розглянуті мономірні ланки полімерів. Зокрема, індекс Вінера з врахуванням специфічних властивостей полімерів може бути обчислений з обмеженням на індивідуальні відстані між вершинами (таким чином враховується тільки близьке оточення вершини). Іншим підходом є використання матриці зворотних відстаней або зворотних квадратів відстаней, у цьому випадку вклади віддалених вершин мінімальні.

Таким чином, запланована програма кількісного опису полімерної структури за допомогою використання локальних топологічних індексів як незалежних змінних при регресійному моделюванні є шляхом для прогнозу важливих, зокрема структурно-механічних властивостей полімерних матеріалів.