

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Мембранные технологии разделения смеси веществ вызывают повышенный интерес. Перспективы применения мембранных технологий определяются созданием новых полимерных мембран с заданными свойствами. Это приводит к необходимости исследования внутренней структуры полимера, динамических процессов, происходящих в макромолекулах, определения свободного объёма полимера и распределения его по размерам. Локальная динамика макромолекул определяет релаксационные свойства полимерных материалов, возможность их практического использования. Изучение взаимосвязи структуры и свойств является ключевым моментом при создании новых материалов.

**Цель работы:** Изучить конформационную динамику макромолекулярных цепей стеклообразных полимеров методом конформационных зондов в сочетании с квантово-химическими расчетами энергий и колебательных спектров различных конформации модельных низкомолекулярных соединений. В качестве объектов исследования взять ряд полиэфиримидов (ПЭИ), поливинилхлорид (ПВХ), полиакрилонитрил (ПАН), конформационная динамика которых может быть обусловлена подвижностью фрагментов основной цепи.

Для этого **были поставлены задачи:**

1. С помощью метода конформационного зонда изучить локальную динамику макромолекулярных цепей ряда стеклообразных ПЭИ, ПАН и ПВХ в температурном интервале 300-100 К.
2. Провести квантово-химические расчеты энергий и колебательных спектров различных конформаций модельных соединений.
3. Оценить параметры вращения бензольных колец макромолекул ряда ПЭИ.
4. Оценить параметры движений типа «коленвал» в макромолекулах ПАН и ПВХ.
5. Интерпретировать ИК спектры поглощения ряда ПЭИ.

**Научная новизна.**

1. Методами конформационных зондов и квантовой химии изучена локальная динамика ряда ПЭИ, ПАН и ПВХ в температурном интервале 300-100 К.
2. Обнаружены вторичные релаксационные переходы стеклообразных ПЭИ, ПАН и ПВХ. Выяснена природа этих переходов.
3. Проведена интерпретация Фурье - ИК спектров ряда ПЭИ. Выделены полосы поглощения для исследования локальной динамики групп  $\text{CH}_3$  и  $\text{CF}_3$ .