

Численные методы в науке о полимерах.

программа специального курса

1. Введение. Понятие о макромолекуле. Мономер, олигомер, полимер. Свободно-сочлененная модель полимерной цепи. Идеальная цепь. Решеточная модель. Блуждание с пересечениями. Алгоритм Розенблатов.
2. Переход клубок-глобула. Метод Монте Карло. Периодические граничные условия. Фазовые переходы в конечных системах.
3. Механизмы гибкости. Сегмент Куна. Персистентные макромолекулы. Модель цепи с флуктуирующей длиной связи. Переход клубок-глобула жесткоцепных макромолекул. Диаграмма состояний.
4. Макромолекулы с амфифильными звеньями. Внутримолекулярная сегрегация. Растворимые глобулы, везикулы, наноцилиндры. Диаграмма состояний. Молекулярная динамика.
5. Гомо-, со- и гетерополимеры. Первичная, вторичная, третичная формы биомacroмолекул. Переход спираль-клубок в гомополимерах.
6. Полимерные сетки. Теория упругости.
7. Разбавленные, полуразбавленные, концентрированные растворы. Макрофазное расслоение. Спинодаль, бинодаль, критическая точка.
8. Полиэлектролиты - слабые и сильные. Блобная модель полиэлектролитной цепи. Полиамфолиты. Изоэлектрическая и изоионная точки. Теория Дебая-Хюккеля. Идеи скейлинга.
9. Диблок-сополимеры. Микрофазное расслоение. Явления самоорганизации. Сферы, цилиндры, ламели, биконтинуальные структуры.
10. Мультимасштабное моделирование. Полноатомная молекулярная динамика. Схемы прямого и обратного картирования.