

ЗАВИСИМОСТ НА НАЛЯГАНЕТО И ПОВЪРХНОСТНОТО НАПРЕЖЕНИЕ ОТ СТЕПЕНТА НА ГЪВКАВОСТ НА ПОЛИМЕРИ И ПАВ

**Андрей Милчев
ИФХ БАН**

С помощта на компютърно моделиране по метода на Молекулна Динамика е показано, че твърдостта на линейни макромолекули оказва значително влияние върху две основни величини във физикохимията - налягане и повърхностно напрежение. Изследванията са проведени за комплексни течности (полимерни стопилки) между две успоредни плоски стени и за Повърхностно Активни Вещества (ПАВ) на междуфазовата граница, разделяща две несмесваеми течности. За целта е предложена модификация на известната формула на Kirkwood & Buff за пресмятане налягането в многочастична система с чифтови взаимодействия, която позволява да се отчетат и триплетни сили, като силите на огъване на връзките в една макромолекула. Симулационните изследвания показват, че твърдостта на макромолекулите има силен ефект в непосредствена близост до интерфейса и се простира на разстояние от порядъка на средностатистическия размер на полимерните вериги.