

УДК 541.64:539.199

## МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА ДВУМЕРНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ СЕТКИ. ДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА<sup>1</sup>

© 1998 г. А. А. Даринский\*, И. М. Неелов\*, Н. К. Балабаев\*\*, F. Sundholm\*\*\*

\*Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук  
199004 Санкт-Петербург, Большой пр., 31

\*\*Институт математических проблем биологии Российской академии наук  
142292 Пущино

\*\*\*Polymer chemistry department, Helsinki university  
PB55, A.I. Virtasen Aukio 1, FIN-00014, Helsinki, Finland

Поступила в редакцию 11.11.97 г.

Принята в печать 15.01.98 г.

Методом молекулярной динамики исследована поступательная и вращательная подвижность мономеров и цепей в двумерной регулярной полимерной сетке. Рассчитаны временные зависимости среднеквадратичных смещений мономеров цепей между узлами и временные ориентационные корреляционные функции звеньев цепей, а также подвижность узлов сетки. Показано, что в регулярной сетке существует анизотропия как поступательной, так и вращательной подвижности мономеров и цепей как целого.

### ВВЕДЕНИЕ

В работе [1] нами был предложен алгоритм моделирования на ЭВМ двумерной регулярной полимерной сетки на основе метода молекулярной динамики. Для сеток с различной плотностью были рассчитаны равновесные характеристики: давление, структура сетки, параметры цепей между узлами, локальная ориентация звеньев цепей. Полученные характеристики были сопоставлены с результатами моделирования для линейного полимера при тех же плотностях. В настоящей работе для той же модели сетки получены характеристики, определяющие динамическое поведение системы: локальная поступательная и ориентационная подвижность узлов и звеньев цепей и ориентационная подвижность цепей между узлами. Как и в работе [1], для выделения сеточного эффекта параллельно проведено моделирование линейного полимера, состоящего из несшитых цепей при тех же плотностях.

### МОДЕЛЬ

Изучали двумерную полимерную сетку на плоскости, в которой имеется  $N_1 = n^2$  узлов и  $2N_1$  одинаковых цепей из  $N_c$  частиц каждая. Частицы узлов не отличались от частиц цепей. Взаимодействие частиц друг с другом описывали "обрезанным" потенциалом Леннарда–Джонса. Для задания свя-

зей между соседними частицами внутри цепей и между узлами и частицами цепей дополнительно вводили потенциал, отвечающий френкелевской пружине. Частицы цепей имели двух соседей, а узловые частицы – четырех. Для сравнения проводили также моделирование двумерной полимерной системы, состоящей из таких же, но не связанных в сетку полимерных цепей и отдельных частиц, эквивалентных узлам сетки. Эта система получалась из сетки путем "разрезания" связей, соединяющих узловые частицы с частицами цепей. На системы были наложены периодические граничные условия (длина стороны периодической ячейки  $H$ ) и, кроме этого, сама сеточная система была периодической, т.е. для каждого направления на квадратной решетке конец последней  $n$ -й цепи сетки связан с первым узлом первой цепи такой же связью, как и все остальные. Поэтому в сетке при уменьшении плотности (увеличении  $H$ ) увеличивается среднее расстояние между узлами  $H/n$ , а следовательно, и степень деформации цепей между узлами. (Подробнее модель, алгоритм расчета и процедура приготовления системы с заданной плотностью описаны в работе [1].)

В качестве единиц длины и энергии использовали параметры потенциала Леннарда–Джонса  $\sigma$  и  $\epsilon$ . Единицей времени, как обычно, служило ха-

рактерное для этого потенциала время  $\tau_0 = \sigma \sqrt{\frac{m}{\epsilon}}$ .

Основные расчеты выполняли для  $N_1 = 5 \times 5$  и  $N_2 = 1000$  (что соответствует длине цепи между узлами  $N_c = 20$ ) при плотности  $\rho = 0.39, 0.52, 0.65$

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 96-03-33833) и фонда INTAS (грант 93-2503ext).

и 0.78 ( $\rho$  – число частиц на единицу площади). Для контроля влияния размеров периодической системы на результаты некоторые расчеты сделаны также для системы, содержащей  $N_1 = 10 \times 10$  узлов. Все расчеты проводили при одной и той же температуре  $T_{ref} = 0.5/k_B$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для изучения динамики сетки мы провели расчет некоторых характеристик локальной поступательной и ориентационной подвижности мономеров и узлов сетки и сопоставили эти результаты с локальными характеристиками несшитых систем. Характеристики поступательной подвижности могут быть определены экспериментально, например методом рассеяния нейтронов. Локальная ориентационная подвижность определяет диэлектрическую релаксацию, ЯМР, деполяризацию люминесценции и т.д. Кроме локальных характеристик мы рассчитали также более крупномасштабные: характеристики ориентационной подвижности цепей между узлами.

### Поступательная подвижность центральных мономеров цепи

Как правило, для характеристики поступательной подвижности мономеров цепи рассчитывают временные зависимости средних квадратов их смещений. Сшивание ограничивает локальную подвижность, поэтому следует ожидать для мономеров цепей роста подвижности при удалении от узла вдоль цепи. Наибольшей подвижностью должны обладать центральные мономеры, и именно для этих мономеров были проведены расчеты. Поступательная подвижность центральных мономеров цепей в трехмерной сетке была исследована методом молекулярной динамики в работах Kremer и Grest с сотр. (см., например, работу [2]). В рассмотренной нами двумерной сетке для каждой цепи при всех плотностях сохраняется средняя ориентация (вдоль оси  $x$  для цепей  $A$  и вдоль оси  $y$  для цепей  $B$ ). Поэтому мы рассчитали отдельно средние квадраты смещений центральных мономеров вдоль направления ориентации  $g_m^{par}(t)$  и перпендикулярно к этому направлению  $g_m^{per}(t)$

$$g_m^{par}(t) = \left( \sum_A \langle (x_m(t) - x_m(0))^2 \rangle + \sum_B \langle (y_m(t) - y_m(0))^2 \rangle \right) / 2N_1 \quad (1)$$

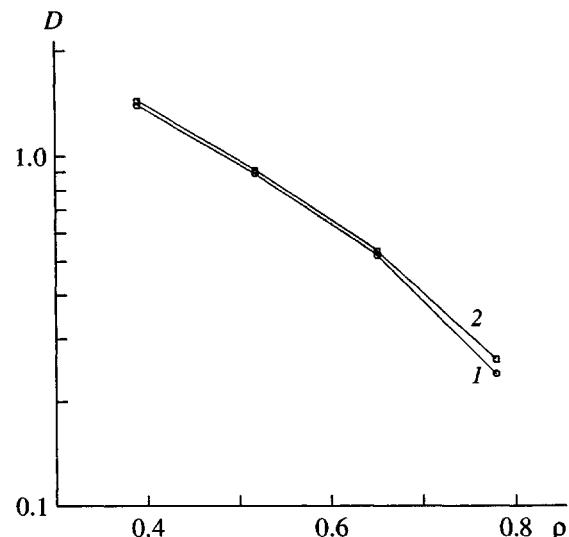


Рис. 1. Зависимость локального коэффициента диффузии от плотности для центрального мономера цепей в линейном полимере (1) и в сетке (2).

$$g_m^{per}(t) = \left( \sum_A \langle (y_m(t) - y_m(0))^2 \rangle + \sum_B \langle (x_m(t) - x_m(0))^2 \rangle \right) / 2N_1 \quad (2)$$

Здесь  $\sum_A$  и  $\sum_B$  означают суммирования по всем центральным мономерам, принадлежащим цепям типа  $A$  и  $B$  соответственно. Эти же характеристики были рассчитаны для центральных мономеров цепей в модельной полимерной жидкости.

Для сравнения данных, полученных при разных плотностях, необходимо учитывать изменение локальной вязкости. С этой целью мы построили зависимости  $g_m^{par}(t')$  и  $g_m^{per}(t')$  от приведенного времени  $t' = tD$ , где  $D$  – локальный коэффициент диффузии, который определяется из начального наклона временной зависимости среднего квадрата смещения

$$g_m(t) = (g_m^{par}(t) + g_m^{per}(t)) / 2 \quad (3)$$

Этот коэффициент оказывается практически одним и тем же для мономеров в сетке и в линейном полимере. Его величина падает с ростом плотности (рис. 1). Сопоставление зависимостей  $g_m^{par}(t')$  и  $g_m^{per}(t')$  для мономеров в сетке и в линейном полимере проведено на рис. 2–4. В приведенных переменных  $t'$  в области малых времен эти зависимости совпадают при всех плотностях, т.е., как и следовало ожидать, в этой области времен наличие сетки не оказывается на движении мономеров. С увеличением времени оно

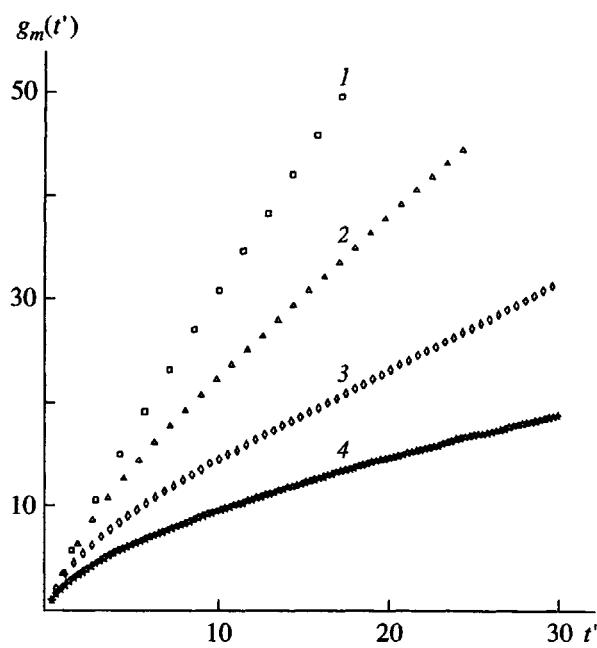


Рис. 2. Временные зависимости среднего квадрата смещения  $g_m(t')$  (1–4) для центрального мономера при  $\rho = 0.39$  (1), 0.52 (2), 0.65 (3) и 0.78 (4).

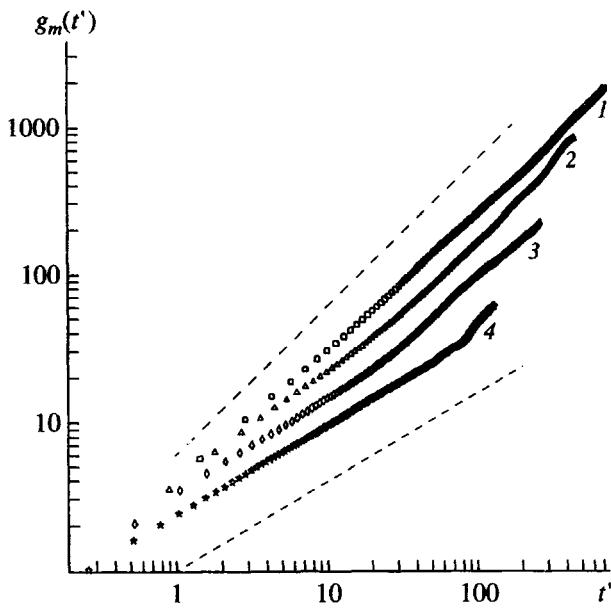


Рис. 3. Зависимости  $\ln g_m(t')$  (1–4) от  $\ln t'$  для центрального мономера при  $\rho = 0.39$  (1), 0.52 (2), 0.65 (3) и 0.78 (4). Наклон штриховой прямой равен единице, точечной – 0.6.

начинает проявляться: величины смещений  $g_m^{par}(t')$  и  $g_m^{per}(t')$  для мономеров в сетке все больше отстают от смещений мономеров в линейном полимере той же плотности.

Обсудим теперь более подробно вид зависимостей  $g_m^{par}(t')$  и  $g_m^{per}(t')$  для центральных мономеров цепей в двумерном линейном полимере и влияние на них плотности системы. Естественно, для линейного полимера поступательная подвижность мономеров изотропна:  $g_m^{par}(t) = g_m^{per}(t) = g_m(t)$ . Как видно из рис. 2, в двумерной системе плотность влияет на локальную поступательную подвижность не только через локальную вязкость: даже при введении приведенного времени  $t'$  меньшим плотностям соответствуют большие смещения, и эти различия возрастают с увеличением времени. Какова природа этого эффекта? В трехмерной полимерной системе повышение средней концентрации полимера приводит к взаимопроникновению цепей и увеличению локальной концентрации чужих звеньев вблизи данного звена. Влияние этого увеличения на подвижность в первом приближении может быть учтено через локальную вязкость путем введения приведенного времени  $t'$ . Тогда зависимости  $g_m(t')$  для разных концентраций будут близки. В двумерной системе взаимопроникновение цепей затруднено, поэтому можно было бы предположить, что наблюдаемое дополнительное уменьшение локальной подвижности связано с эффектом "клетки", создаваемой соседними цепями. Но "клеточный" эффект должен проявляться только в области смещений  $g_m^{par}(t') = g_m^{per}(t')$  порядка площади  $d^2$ , приходящейся на одну цепь. В нашем же случае (рис. 2) уменьшение подвижности с ростом плотности начинает проявляться уже при существенно меньших смещениях. По-видимому, специфика двумерной системы состоит в том, что ее компактизация сопровождается увеличением локальной концентрации звеньев своей же цепи вблизи выделенного звена, и этот эффект не может быть учтен только введением локальной вязкости. Мы предполагаем исследовать данный вопрос более подробно в следующих работах.

Рассмотрим теперь форму зависимости  $g_m(t')$ . В отличие от диффузии отдельной броуновской частицы временные зависимости  $g_m(t')$  при смещениях меньших, чем размеры цепи как целого, нелинейные. Поэтому для их описания часто используется степенной закон  $g_m(t') \propto (t')^\gamma$ . Для отдельной раузовской цепи без объемных эффектов  $\gamma = 0.5$  [3]. Как показано в работе [4], для раузовской цепочки с исключенным объемом  $\gamma = 0.54$  для трехмерного и 0.6 для двумерного случаев соответственно. Близкие значения получены методом Монте-Карло в работе [5] для отдельной цепи в узкой щелевидной поре. Чтобы определить величины  $\gamma$  для рассмотренной несшитой двумерной полимерной системы, мы построили зависимости  $g_m(t')$

в двойных логарифмических координатах (рис. 3). Значения  $\gamma$ , полученные из наклона этих зависимостей, на не слишком больших временах близки к 0.6. При увеличении времени происходит переход к диффузии цепи как целого, и наклон зависимостей приближается к единице. При этом длина участка, на котором наклон зависимости близок к 0.6, растет с повышением плотности системы. В работе [4] величина  $\gamma$  связывалась с показателем  $v$  в зависимости размеров цепи от числа мономеров  $N R_g^2 \propto N^{2v}$ :

$$\gamma = 1/(1 + 1/2v) \quad (4)$$

Чтобы проверить эту связь для нашего случая, необходимо иметь результаты для линейного полимера с разной длиной цепей  $N_c$ . Мы провели соответствующие расчеты для нашей модели и предполагаем представить эти результаты в ближайшем будущем.

Обратимся теперь к локальной поступательной подвижности центральных мономеров цепей в сетке. Первое отличие подвижности в сетке от изотропной полимерной системы – заметная анизотропия смещений: за исключением малой начальной области времен отношение  $g_m^{per}(t')/g_m^{par}(t') > 1$ , т.е. смещения мономеров вдоль направлений преимущественной ориентации затруднены по сравнению со смещениями в попечном направлении (рис. 4). Величина этого отношения сначала увеличивается с ростом  $t'$ , а затем выходит на асимптоту при больших  $t'$ . При повышении плотности асимптотическое значение уменьшается от  $\approx 1.7$  при  $\rho = 0.39$  до  $\approx 1.3$  при  $\rho = 0.78$ , т.е. в  $\sim 1.3$  раза. Эта анизотропия подвижности связана с тем, что концы цепей включены в сетку и расстояния между концами флюктуируют вблизи средних значений, равных длине ячейки сетки  $d = H(\rho)/n$ . Степень натяжения цепей в менее плотной системе больше, чем в более компактной, что и приводит к увеличению анизотропии. Грубая оценка максимальной анизотропии для смещения центрального мономера в цепи с контурной длиной  $L = N_c b$  и фиксированными на расстоянии  $d$  концами дает

$$g_m^{per}(t')/g_m^{par}(t') = \frac{L+d}{L-d} \quad (5)$$

В нашем случае длина звена  $b \approx 1.1$  и  $N_c = 20$ . Тогда при переходе от системы с плотностью  $\rho = 0.39$  ( $a = 10.25$ ) к системе с плотностью  $\rho = 0.78$  ( $d = 7.25$ ) отношение (3) уменьшится в  $\approx 1.4$  раза, что близко к значению 1.3, полученному при моделировании.

Другое отличие локальной поступательной подвижности мономеров в сетке от мономеров в линейном полимере проявляется в асимптотичес-

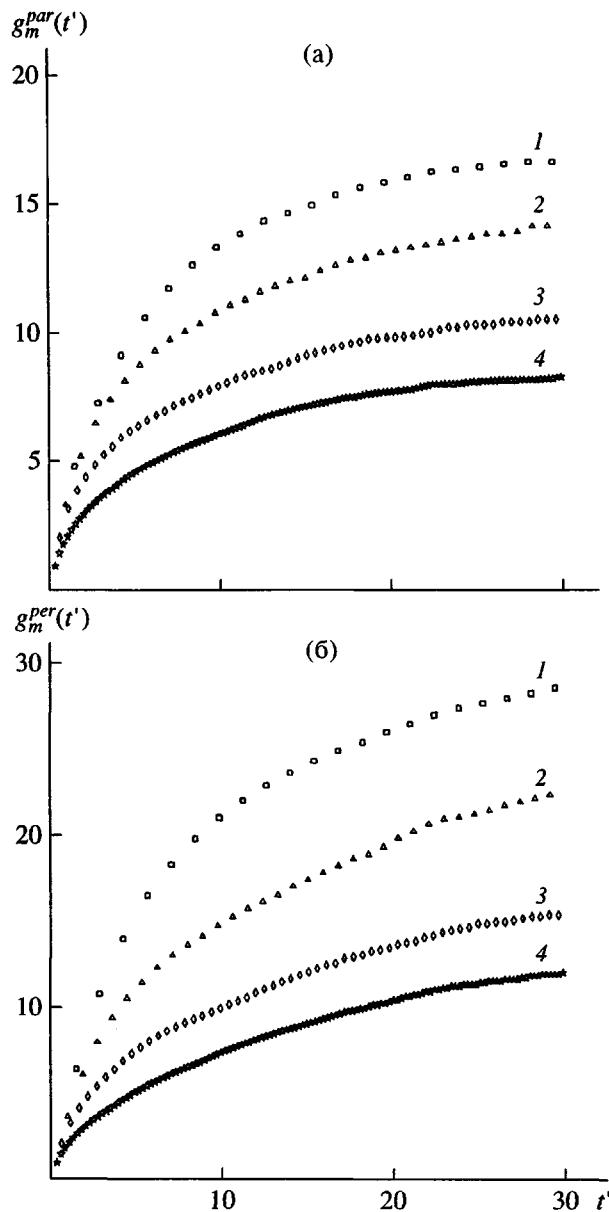


Рис. 4. Временные зависимости смещений вдоль направлений средней ориентации цепей  $g_m^{par}(t')$  (а) и перпендикулярно ей  $g_m^{per}(t')$  (б) для центрального мономера цепей в сетке при  $\rho = 0.39$  (1), 0.52 (2), 0.65 (3) и 0.78 (4).

ком поведении  $g_m^{per}(t')$  и  $g_m^{par}(t')$ . В линейном полимере эти величины монотонно увеличиваются со временем, а в сетке, начиная с некоторого времени, практически перестают расти. Причина этого различия понятна: узлы не позволяют мономерам цепей смещаться слишком далеко. С повышением плотности уменьшается степень деформации цепей между узлами. Поэтому можно было бы ожидать, что максимальные значения смещений

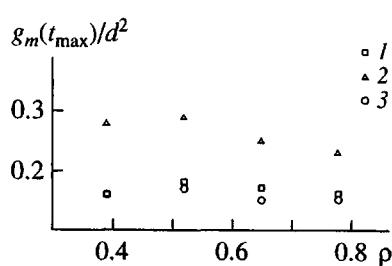


Рис. 5. Отношения максимальных смещений  $g_m^{par}(t_{\max})/d^2$  (1) и  $g_m^{per}(t_{\max})/d^2$  (2) к площади, приходящейся на одну цепь, для центрального мономера цепей в сетке как функция плотности цепей в системе.

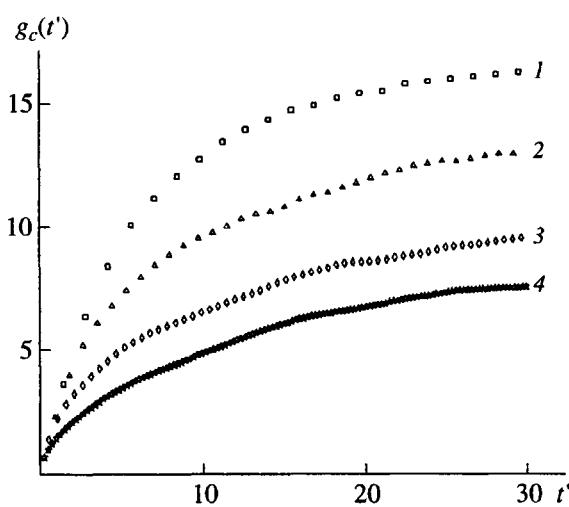


Рис. 6. Временные зависимости среднеквадратичных смещений узлов сетки  $g_c(t')$  при  $\rho = 0.39$  (1),  $0.52$  (2),  $0.65$  (3) и  $0.78$  (4).

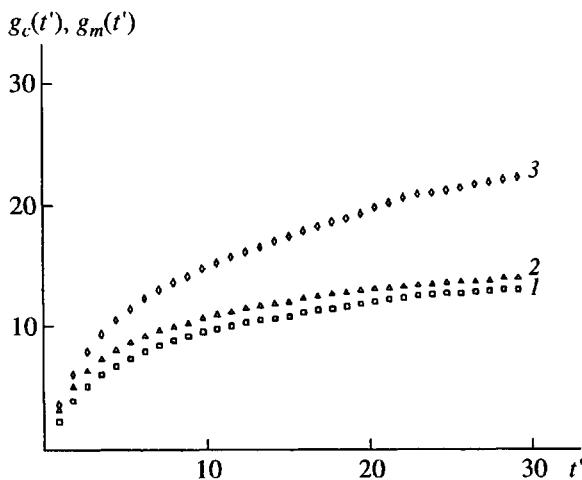


Рис. 7. Временные зависимости среднеквадратичных смещений узлов сетки  $g_c(t')$  (1),  $g_m^{par}(t')$  (2) и  $g_m^{per}(t')$  (3) при плотности сетки 0.65.

будут при этом расти. Однако наблюдается обратное: с увеличением плотности асимптотические значения  $g_m^{par}(t_{\max})$  и  $g_m^{per}(t_{\max})$  уменьшаются (рис. 4). Мы предположили, что этот эффект связан с ограничением доступной для смещений площади, налагаемым другими цепями и построили зависимости отношений указанных значений к площади  $d^2$ , приходящейся на одну цепь. Действительно, зависимости этих отношений от плотности оказались слабыми (рис. 5), что подтверждает нашу гипотезу.

#### Поступательная подвижность узлов

Для характеристики локальной поступательной подвижности узлов мы рассчитали их среднеквадратичные смещения вдоль осей  $x$  и  $y$ :

$$g_c^x(t) = \langle (x_c(t) - x_c(0))^2 \rangle \quad (6)$$

$$g_c^y(t) = \langle (y_c(t) - y_c(0))^2 \rangle, \quad (7)$$

где усреднение проводится по времени и по всем узлам сетки. Как и следовало ожидать, подвижность узлов оказалась изотропной:  $g_c^x(t) = g_c^y(t) = g_c(t)$ . Для учета влияния плотности на локальную вязкость мы, как и ранее, использовали приведенное время  $t'$  при построении зависимостей  $g_c(t')$ , полученных при разных плотностях (рис. 6). Качественно поведение  $g_c(t')$  сходно с поведением  $g_m^{par}(t')$  и  $g_m^{per}(t')$  для центральных мономеров в сетке (рис. 4): нелинейная зависимость  $g_c(t')$  при больших временах выходит на асимптоту, а начальные наклоны для кривых  $g_c(t')$  при разных плотностях близки. С ростом времени  $t'$  эти кривые начинают различаться, причем за одно и то же приведенное время  $t'$  узлы, как и мономеры, в более плотных системах смещаются меньше, чем в менее компактных. Поступательная подвижность узла при малых временах меньше, чем поступательная подвижность центрального мономера, а при больших временах  $g_c(t')$  приближается к  $g_m^{par}(t')$  (рис. 7). Меньшая подвижность узлов по сравнению с мономерами цепей между узлами была продемонстрирована ранее для трехмерных систем в работах [2, 6].

Асимптотические значения  $g_c(t_{\max})$  для узлов, как и для центральных мономеров, уменьшаются с ростом плотности. Причина этого эффекта та же: уменьшение доступной для смещений площади. Это следует из независимости отношения  $g_c(t_{\max})$  к площади  $d^2(\rho)$ , приходящейся на одну цепь (рис. 5).

### Ориентационная подвижность звеньев цепей

В качестве характеристик ориентационной подвижности обычно используются ориентационные корреляционные функции [7], в частности, корреляционная функция

$$P_1(t) = \frac{\langle \mathbf{b}(0)\mathbf{b}(t) \rangle}{b^2}, \quad (8)$$

где  $\mathbf{b}(0)$  и  $\mathbf{b}(t)$  – векторы звена в моменты времени 0 и  $t$  соответственно. Для ориентированных систем необходимо рассчитывать анизотропные корреляционные функции [8, 9]

$$P_1^x(t) = \frac{\langle b_x(0)b_x(t) \rangle - \langle b_x \rangle^2}{\langle b_x^2 \rangle - \langle b_x \rangle^2} \quad (9)$$

$$P_1^y(t) = \frac{\langle b_y(0)b_y(t) \rangle - \langle b_y \rangle^2}{\langle b_y^2 \rangle - \langle b_y \rangle^2} \quad (10)$$

( $b_x$  и  $b_y$  – проекции вектора  $\mathbf{b}$ ). Поскольку, как уже говорилось выше, в рассматриваемой квадратной сетке имеются два типа цепей (цепи A, ориентированные преимущественно вдоль оси  $x$ , и цепи B, ориентированные преимущественно вдоль оси  $y$ ), мы рассчитали следующие корреляционные функции:

$$P_1^{par}(t) = \left( \sum_A P_1^x + \sum_B P_1^y \right) / 2N_1 \quad (11)$$

$$P_1^{per}(t) = \left( \sum_A P_1^x + \sum_B P_1^y \right) / 2N_1 \quad (12)$$

Функции (11) и (12) характеризуют динамику проекций звеньев на направление ориентации и на перпендикулярное направление соответственно. Расчеты функций (11) и (12) были проведены для двух типов звеньев цепей в сетке: звеньев, соединяющих первую и вторую частицы каждой цепи, считая от узла (узел считается нулевой частицей), и для центральных звеньев. Параллельно были проведены расчеты этих функций для центральных звеньев цепей в линейном полимере.

Как и ранее, для учета изменения локальной вязкости с плотностью времени зависимости (11) и (12) представлены в приведенном времени  $t'$ .

В изотропном линейном полимере функции (11) и (12) для звена цепи не различаются:  $P_1^{par}(t) = P_1^{per}(t) = P_1(t)$ . В приведенном времени  $t'$  функции  $P_1(t')$  для центральных звеньев, отвечающие разным плотностям, близки (рис. 8). Таким обра-

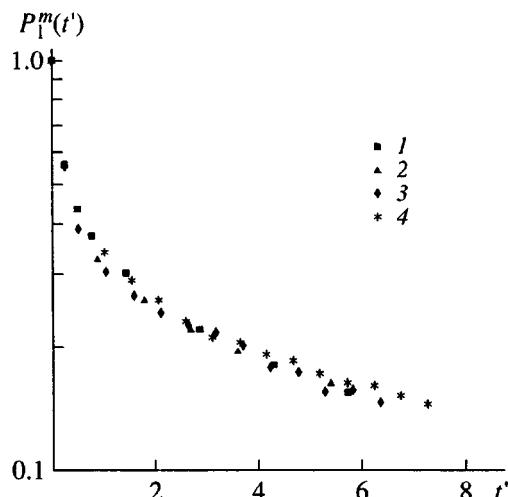


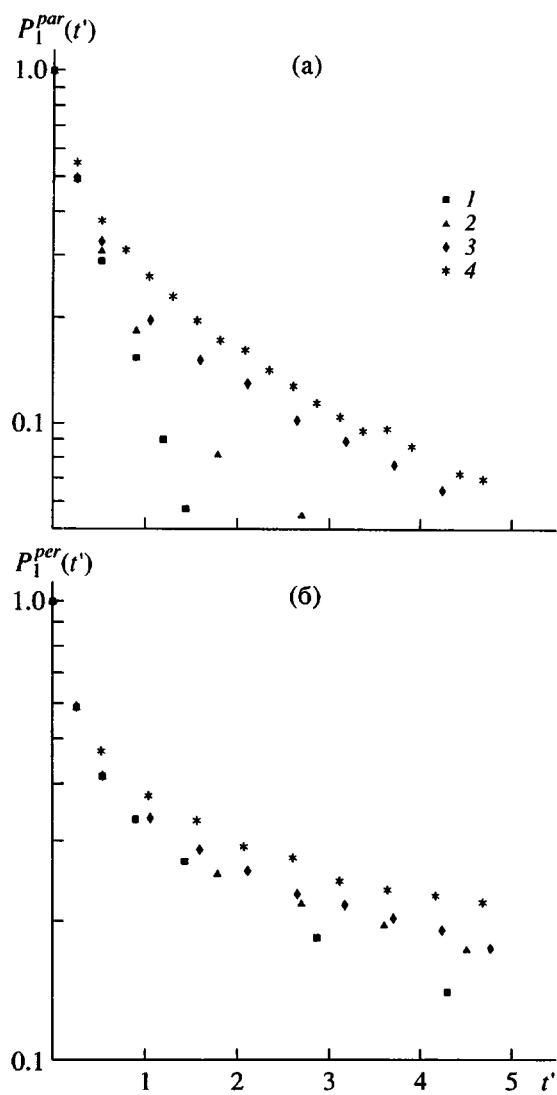
Рис. 8. Временные ориентационные корреляционные функции звеньев цепей  $P_1^m(t')$  для центрального звена при  $\rho = 0.39$  (1), 0.52 (2), 0.65 (3) и 0.78 (4).

зом, влияние плотности на локальную ориентационную подвижность в линейном полимере практически полностью учитывается изменением локальной вязкости.

Иная ситуация наблюдается в сетке. Во-первых,  $P_1^{par}(t) \neq P_1^{per}(t)$ , т.е. наблюдается анизотропия локальной ориентационной подвижности (рис. 9). Во-вторых, кривые, отвечающие разным плотностям, даже в приведенном времени  $t'$  не совпадают. С ростом деформации цепи (уменьшением плотности) происходит ускорение релаксации обеих функций. Аналогичный эффект наблюдался ранее методом броуновской динамики при достаточно больших деформациях для отдельной трехмерной цепи, как при ее растяжении за концы внешней силой [10–12], так и при закреплении концов цепи на определенном расстоянии [13]. Физическая природа ускорения ориентационной подвижности цепи при ее растяжении заключается в обоих случаях в увеличении эффективной упругости цепи. Для соседнего с узлом звена цепи влияние плотности (деформации) на его ориентационную подвижность оказывается качественно аналогичным. Однако величина эффекта меньше, чем для центрального звена. Понятно, что это связано с кинематическими ограничениями, накладываемыми узлом на подвижность соседних звеньев.

### Ориентационная подвижность цепей между узлами

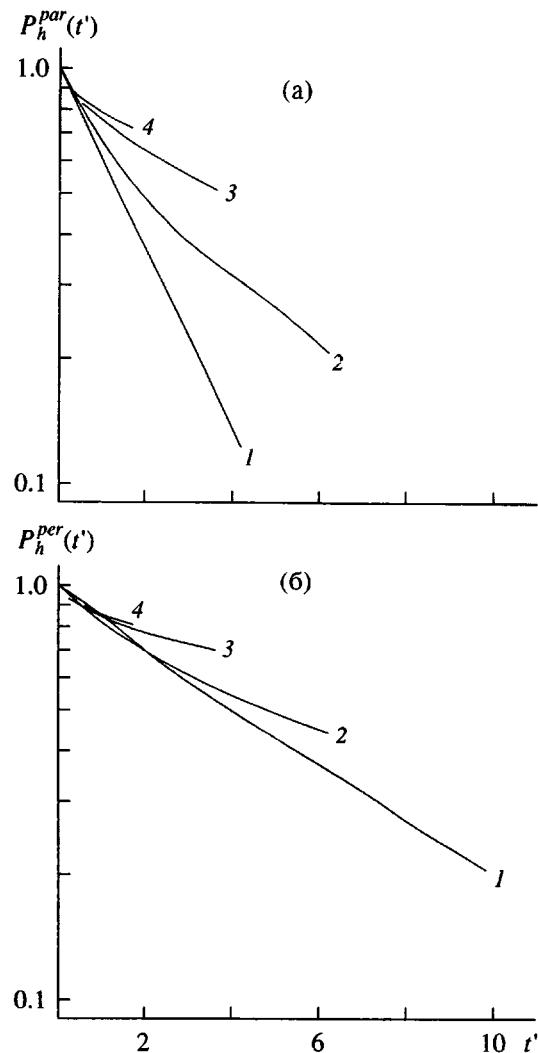
При сшивании цепей в сетку возникает новый масштаб: размер цепи между узлами, поэтому важной динамической характеристикой сетки



**Рис. 9.** Временные ориентационные корреляционные функции звеньев цепей \$P\_1^{par}(t')\$ (а) и \$P\_1^{per}(t')\$ (б) для центрального звена цепи при \$\rho = 0.39\$ (1), 0.52 (2), 0.65 (3) и 0.78 (4).

является ориентационная подвижность цепи как целого. Как было показано в работе [14], именно указанная характеристика определяет диэлектрическую релаксацию сеток, образованных полимерными цепями с продольной составляющей дипольного момента. Как и при изучении локальной ориентационной подвижности, мы рассчитали анизотропные корреляционные функции

$$P_h^{par}(t) = \left( \sum_A P_h^x + \sum_B P_h^y \right) / 2N_1 \quad (13)$$



**Рис. 10.** Временные ориентационные корреляционные функции для проекций вектора, соединяющего концы цепей между узлами: \$P\_h^{par}(t')\$ (а) и \$P\_h^{per}(t')\$ (б) при \$\rho = 0.39\$ (1), 0.52 (2), 0.65 (3) и 0.78 (4).

$$P_h^{per}(t) = \left( \sum_A P_h^x + \sum_B P_h^y \right) / 2N_1, \quad (14)$$

где суммирование проводится так же, как в выражениях (11) и (12), а

$$P_h^x(t) = \frac{\langle h_x(0)h_x(t) \rangle - \langle h_x \rangle^2}{\langle h_x^2 \rangle - \langle h_x \rangle^2} \quad (15)$$

$$P_h^y(t) = \frac{\langle h_y(0)h_y(t) \rangle - \langle h_y \rangle^2}{\langle h_y^2 \rangle - \langle h_y \rangle^2} \quad (16)$$

Здесь  $h_x$  и  $h_y$  – проекции вектора  $\mathbf{h}$  на оси  $x$  и  $y$ . Функции (15) и (16) характеризуют динамику проекций векторов расстояний между концами цепей между узлами на направление ориентации и на перпендикулярное направление соответственно. Как и ранее, для сопоставления этих функций при разных плотностях мы используем приведенное время  $t'$ . Как видно из рис. 10, с ростом деформации релаксация  $P_h^{par}(t')$  и  $P_h^{per}(t')$  ускоряется, причем это ускорение сильнее выражено для релаксации проекции  $h_{par}$  вектора  $\mathbf{h}$  на направление ориентации. Наблюдаемое поведение аналогично поведению функций, характеризующих локальную подвижность (рис. 9). Таким образом, изменение плотности сетки (деформации цепей) влияет аналогично на ориентационную динамику для обоих характерных масштабов полимерной сетки: мономерного звена и цепи между узлами. В обоих случаях происходит ускорение ориентационной релаксации из-за увеличения эффективной упругости цепей между узлами при их растяжении.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Неелов И.М., Даринский А.А., Балабаев Н.К., Sundholm F.* // Высокомолек. соед. 1998 (в печати).
2. *Duering E., Kremer K., Grest G.* // J. Chem. Phys. 1994. V. 101. P. 8169.
3. *De Gennes P.G.* // Physics. 1967. V. 3. P. 37.
4. *Kremer K., Binder K.* // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 6381.
5. *Milchev A., Binder K.* // J. Phys. II France. 1986. V. 6. P. 21.
6. *Неелов И.М., Даринский А.А., Готлиб Ю.Я., Балабаев Н.К.* // Высокомолек. соед. А. 1980. Т. 22. № 8. С. 1761.
7. *Darinsky A., Gotlib Yu., Balabaev N., Neelov I.* // Macromolecules. 1980. V. 13. № 3. P. 602.
8. *Даринский А.А., Лукьянов М.Н., Готлиб Ю.Я., Неелов И.М.* // Журн. физ. химии. 1983. Т. 57. № 4. С. 954.
9. *Darinsky A., Lyulin A., Neelov I.* // Makromol. Chem., Theory Simul. 1993. № 2. P. 523.
10. *Неелов И.М.* Дис.... д-ра физ.-мат. наук. Л.: ИВС АН СССР, 1992.
11. *Даринский А.А., Готлиб Ю.Я., Люлин А.В., Неелов И.М.* // Высокомолек. соед. А. 1994. Т. 36. № 7. С. 1148.
12. *Неелов И.М., Люлин А.В., Торчинский Ф.И., Даринский А.А., Кук Р.* // Высокомолек. соед. А. 1996. Т. 38. № 8. С. 1394.
13. *Haliloglu T., Bahar I., Erman B.* // J. Chem. Phys. 1992. V. 97. № 6. P. 4428.
14. *Готлиб Ю.Я., Гуртовенко А.А.* // Высокомолек. соед. А. 1996. Т. 38. № 4. С. 615.

### Molecular Dynamics of a Two-Dimensional Polymer Network: Dynamic Properties

**A. A. Darinskii\*, I. M. Neelov\*, N. K. Balabaev\*\*, and F. Sundholm\*\*\***

\* Institute of Macromolecular Compounds, Russian Academy of Sciences,  
Bol'shoi pr. 31, St. Petersburg, 199004 Russia

\*\* Institute of Mathematical Problems of Biology,  
Russian Academy of Sciences, Pushchino, Moscow Region, 142292 Russia

\*\*\* Polymer Chemistry Department, Helsinki University, PB55,  
A.I. Virtasen Aukio 1, FIN-00014, Helsinki, Finland

**Abstract**—Translational and rotational mobility of monomer segments and chains in a two-dimensional regular polymer network was studied by methods of molecular dynamics. Time dependences of the average square displacement of monomers in the chains between network junctions are calculated. Orientational correlation time functions of chain segments are obtained. Mobility of network junctions is determined. It is shown that a regular polymer network exhibits translational and rotational anisotropy of monomers and chains as a whole.