

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДЕСТРУКЦИИ МАКРОМОЛЕКУЛ СО СЛОЖНОЙ ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ

Пен В.Р., Левченко С.И.

*Сибирский государственный технологический университет*

*Красноярск, Россия; e-mail [2507rz@mail.ru](mailto:2507rz@mail.ru)*

## THE MONTE CARLO'S METHOD IS BEING USED TO MODELING OF MACROMOLECULES WITH COMPLEX TOPOLOGICAL STRUCTURE DESTRUCTION

Pen V.R., Levchenko S.I.

*Siberian State Technological University, Krasnoyarsk, Russia*

Теория деструкции довольно детально разработана для однородных полимеров с линейной и разветвленной (дендровидной) топологической структурой макромолекул. При анализе разрушения неоднородных сетчатых полимеров (таких, например, как древесный лигнин) возникают серьезные математические трудности. Для изучения таких процессов успешно используется имитационное моделирование методом статистических испытаний (Монте-Карло).

Процесс моделирования статистической деструкции включает операции: генерацию графа, имитирующего анализируемую топологическую структуру макромолекулы, узлами которого являются мономерные звенья, а ребрами – связи между ними; нумерацию ребер графа; многократное «разыгрывание» номеров удаляемых ребер (т.е. номеров разрываемых связей); подсчет числа и размеров фрагментов ( $x$ -меров), образующихся в результате разрыва связей; построение дифференциальных кривых распределения  $x$ -меров по молекулярным массам (кривых ММР).

В ходе исследования процесса делигнификации древесины рассмотрены такие структуры: линейная; дендровидная с разветвлениями от каждого узла; дендровидная с редкими нерегулярными (случайными) разветвлениями; сетчатая нерегулярная (с разной степенью «сшивки»). Две первые структуры включены в исследование в качестве тестов для оценки информативности и точности метода.

Установлено, что статистическая деструкция полимеров с унимодальным исходным ММР и сложной (дендровидной и сетчатой) топологической структурой макромолекул сопровождается появлением бимодальных кривых ММР образующихся продуктов разрушения. Следствием существования циклов (внутримолекулярных «сшивок») в макромолекулах является увеличение массовой доли и степени полимеризации высокомолекулярных фракций и уменьшение доли низкомолекулярных фракций в продуктах разрушения. По мере увеличения степени деструкции кривые ММР становятся

унимодальными. Моделирование позволяет проследить изменение вида и параметров ММР полимера в зависимости от топологической структуры макромолекул. Этот прием успешно использован авторами сообщения при анализе особенностей промышленных способов делигнификации древесины.