

# ПОЛИМЕРЫ – НОВЫЙ КЛАСС ПСЕВДОЩЕЛЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ

Е.К. Иванова, Б. Аскарлов, И.Н. Нургалиев, М.В. Коноплева, Ш.  
Шералиева,

Б.Л. Оксенгендлер, С.Ш. Рашидова

Научно-исследовательский Центр химии и физики полимеров при  
Национальном

Университете Узбекистана им. М. Улугбека, Ташкент, 100128, Узбекистан  
oksengendlerbl@yandex.ru

(Получена 26.11.2015)

Полимерларни электрон структураси <sup>3</sup>ақида псевдотир $\pm$ иш деб номланган  
янги

тасаввурлар таклиф этилган. Ушбу тасаввурларнинг <sup>2</sup>ояси ман этилган зонада  
электрон

<sup>3</sup>олатларини думлари мавжудлигига асосланган. Бу полимерлар  
структурасидаги

тартибсизлик билан бо<sup>2</sup>ли $\pm$  бўлиб, полимерларни  $\pm$ атор янги хоссаларини  
очиш ва

полимерлар физикасида бугунги кунда маълум бўлган эффектларни  
тушуниш имконини

беради.

Предложены новые псевдощелевые представления об электронной структуре  
полимеров.

Основная идея базируется на существовании хвостов электронных состояний  
в запрещенной

зоне, что связано с неупорядоченностью структуры полимера. Новые  
представления позволяют

предсказать ряд новых свойств и дать новую трактовку известным эффектам  
в физике

полимеров.

Novel pseudogap representations on electronic structure of polymers are  
suggested. General idea based

on the existance of electronic tails in the gap. These tails are connected with  
nonorder of polymer

structures. Novel idea permits us to predict some new properties and to treat of  
well known phenomena

in polymer physics.

## I. КЛАССИФИКАЦИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ

## ПОЛИМЕРНЫХ СТРУКТУР

Учитывая общие тенденции развития физики конденсированных сред, представления физики и химии полимеров строились в двух почти независимых

аспектах: молекулярно-кинетической теории и электронной теории, причем с превосходством первого аспекта [1, 2]. Второй (электронный) аспект долгое время

считался необязательным, и лишь только с открытием биологических полимеров

(ДНК, белков и др.) встал вопрос об их электронной структуре. Наибольшие усилия

в этом направлении приложили венгерская (Ладик, [3]) и французская школы (Пюльман, [4]), исходившие при расчетах исключительно из периодических моделей структуры макромолекул. Так в эту область физики полимеров была внедрена зонная модель. Однако очень многие проблемы остались нерешенными в

рамках этих представлений: на некоторые из них указал Бриллюэн (см. [3]); ряд

нерешенных эффектов отмечен в работах Платэ с сотрудниками [5].

Это все, на наш взгляд, требует существенного пересмотра простой зонной модели, главный результат которой состоит в наличии валентной зоны и зоны

проводимости, разделенных щелью в электронном спектре. Мы полагаем, что этот

результат связан с излишним упрощением объекта – полимера, в котором, как

### ПОЛИМЕРЫ – НОВЫЙ КЛАСС ПСЕВДОЩЕЛЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ

413

будет выяснено ниже, систематически присутствует беспорядок структуры, что

требует обязательного привлечения в анализ идей теории неупорядоченных сред

[6].

К настоящему времени предложено довольно много моделей, в которых изучается электронная структура неупорядоченных сред; важнейшие из них – это

модель сплава замещения, жидкостная модель, модель диагонального беспорядка

(Андерсон), модель недиагонального беспорядка (И.М. Лифшиц) [6].

Результатом

расчета этих моделей является модификация плотности электронных состояний,

что радикально отличается от моделей обычной двухзонной структуры. Это приводит к превращению щели в электронном спектре в псевдощель, т.е. к наличию выраженных хвостов плотности состояний в запрещенной зоне. Эти хвосты приводят к принципиальному изменению свойств материалов.

Таким образом, основной задачей является соотнесение существующих электронных моделей определенным структурам полимеров, после чего станет ясен

тип псевдощелей, характерных для конкретных типов полимеров.

Проведенный

нами анализ показал, что реализуются несколько характерных ситуаций (рис. 1):

А) Наличие одной функциональной добавки на регулярной полимерной цепи моделируется беспорядком замещения (пример – группа NH<sub>3</sub> + на хитозане);

Б) Наличие многих разнотипных функциональных добавок в структуре, моделируемых моделью диагонального беспорядка Андерсона (пример – ДНК со

случайным расположением А, Т, Г, Ц или белки со случайными группами R).

В) Случайное чередование двух структурных единиц (мономеров) описывается

моделью с недиагональным беспорядком Лифшица (пример – сополимер

†хитин-

хитозан†)

**Рис. 1.** Модели беспорядка, приводящие к псевдощели в электронном спектре материалов;

I – потенциал энергии электронов цепи; II – псевдощелевая зонная структура

Г) Сосуществование в глобуле петель различного типа с неодинаковым размером моделируется комбинацией диагонального и недиагонального беспорядков (этот тип беспорядка пока теоретически не анализирован).

Ранее в качестве примера радикального влияния псевдощели и соответствующей ей локализации электронов на свойства полимеров и процессов с их

Е. ИВАНОВА, Б. АСКАРОВ, И. НУРГАЛИЕВ, М. КОНОПЛЁВА, Ш. ШЕРАЛИЕВА, ...

414 *Uzbek J. Phys.*, 2016, Vol.18(№6)

участием нами была рассмотрена сорбция малой молекулы (например, олигомера хитозана) на молекуле двухспиральной ДНК [7]. Было показано, что коэффициент адсорбции выражается формулой  $1 - \text{const} \cdot 2m \cdot Q = -l$ , где  $lm$  – длина олигомера, а  $\text{const}$  оказывается величиной, сильно зависящей от параметров беспорядка Андерсона.

Таким образом, проведенный анализ роли псевдощели оказывается важным в проблемах бактерицидной активности хитозана, а это, на наш взгляд, лишь первый пример, указывающий на важную роль псевдощели в полимерах. В настоящей работе псевдощелевая концепция будет распространена на общую проблему реакционной способности полимеров, а также на возможную роль в механизме перехода клубок-глобула.