**Свойства циклических полимеров этиленоксида: метод молекулярной динамики**

***Бакулин И.К.1,2***

*Аспирант, 2 год обучения*

*1Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия*

*2Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия  
E-mail:* [*b*](mailto:ivanov@yandex.ru)*akulin.ik@phystech.edu*

Молекулярное моделирование полимерных соединений представляет большой интерес для поиска принципиально новых функциональных материалов в случаях, когда эксперимент либо слишком дорог, либо трудно осуществим. Одним из таких примеров является создание полимерных мембран с селективной проводимостью ионов в проточных Red/Ox элементах – перспективных систем накопления энергии. Метод молекулярной динамики позволяет быстро искать состав и конформации полимерных соединений, удовлетворяющих нужным свойствам мембран. Однако для его корректного применения необходим подбор силовых полей, удовлетворяющих экспериментальным данным. В работе проводится сравнительный анализ силовых полей Смита [1] и OPLS-AA/CM1A [2] в тройной системе полиэтиленоксид-вода-ионы. Для описания воды используется модель TIP4P, параметры взаимодействия ионов взяты из модели Йоргенсена [3].

Взаимодействие полимер-вода проверяется на примере водного раствора диоксана [4] (циклический димер этиленоксида). Рассчитываются теплофизические свойства раствора (плотность, вязкость, энтальпия растворения), а также среднее число водородных связей на молекулу воды на всем диапазоне молярных концентраций диоксана. Сравнение с экспериментом показывает, что модель Смита достаточно хорошо воспроизводит экспериментальные данные по энтальпии растворения, в то время как OPLS-AA/CM1A сильно ее занижает. Малый размер кластеров диоксана в модели OPLS-AA/CM1A, по сравнению с моделью Смита, согласуется с занижением энтальпии в этой модели. Анализ количества молекул в кластерах диоксана согласуется с экспериментальными данными по рентгеновскому рассеянию [5] на образцах малой концентрации.

Взаимодействие полимер-ион проверяется на примере образования комплексов молекулой 18-краун-6 эфира [6] (циклический полимер этиленоксида, 6 звеньев) с ионами щелочных металлов. Расчет энергий образования комплексов проводится при помощи потенциала средней силы. Сравнение рассчитанных энергий с экспериментальными данными показывает, что модель OPLS-AA/CM1A воспроизводит свойство селективности краун-эфира, начиная с иона К+, а в модели Смита образование комплекса не происходит.

*Работа подготовлена в ходе исследований в рамках Программы академического лидерства «Приоритет 2030» в МФТИ (НИУ).*

**Литература**

1. Smith G.D. et al. A revised quantum chemistry‐based potential for poly (ethylene oxide) and its oligomers in aqueous solution // J. Comput. Chem. 2002. Vol. 23(15). P. 1480-1488.

2. Dodda L.S. et al. LigParGen web server: an automatic OPLS-AA parameter generator for organic ligands // Nucleic Acids Res. 2017. Vol. 45(W1). P. W331-336.

3. Jensen K.P., Jorgensen WL. Halide, ammonium, and alkali metal ion parameters for modeling aqueous solutions // J. Chem. Theory Comput. 2006. Vol. 2(6). P. 1499-1509.

4. Bakulin I. Et al. Properties of aqueous 1, 4-dioxane solution via molecular dynamics // J. Chem. Phys. 2021. Vol. 155(15). P. 154501.

5. Takamuku T. et al. Structure and dynamics of 1, 4-dioxane-water binary solutions studied by X-ray diffraction // J. Mol. Liq. 1999. Vol. 83(1-3). P. 163-77.

6. Bakulin I.K. et al. Molecular dynamics simulation of ion binding in aqueous solution of 18-crown-6 ether // J. Phys. Conf. Ser. 2021. Vol. 1787(1). P. 012010.