**Анализ сети водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана методом молекулярной динамики**

***Бакулин И.К.1,2***

*Аспирант, 3 год обучения*

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

*2Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия
E-mail:* *b**akulin.ik@phystech.edu*

Диоксан является широко распространенным промышленным растворителем, обладающим рядом важных свойств. Например, диоксан способен смешиваться с водой в любых мольных соотношениях. В силу этого, исследование структуры водного раствора диоксана представляет большой научный интерес как с экспериментальной, так и с теоретической точки зрения. Метод молекулярной динамики позволяет исследовать характеристики раствора, недоступные экспериментальным техникам, а также способен проверить соответствие существующих силовых полей экспериментальным результатам.

В настоящей работе [1] проводится сравнительный анализ сетей водородных связей в водном растворе 1,4-диоксана в силовых полях Смита [2] и OPLS-AA/CM1A [3] с моделью воды TIP4P. Рассчитывается общее число водородных связей на атом кислорода и удельное число водородных связей вода-вода и диоксан-вода, полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными по рентгеновскому рассеянию [4]. Вводится геометрический критерий перколяции сети водородных связей. Положения рассчитанных порогов перколяции сравниваются с экспериментом по широкополосной диэлектрической спектроскопии [5]. Расчеты проводятся в программном пакете LAMMPS, анализ молекулярно-динамических траекторий осуществляется с помощью программных пакетов TRAVIS и MDAnalysis.

Оба силовых поля хорошо описывают экспериментальные данные [4] по общему числу водородных связей на атом кислорода. Однако различия в сетях водородных связей между используемыми моделями наблюдаются только анализе удельных чисел водородных связей вода-вода и диоксан-вода. Заниженные значения числа связей вода-вода в модели OPLS-AA/CM1A согласуются с занижением энтальпии растворения [6]. Оба силовых поля адекватно воспроизводят эксперимент [5] по нижнему порогу перколяции сети водородных связей. В отличие от OPLS-AA/CM1A, начало перколяции в модели Смита очень близко к экспериментальному верхнему порогу перколяции. При низких концентрациях диоксана в растворе присутствуют кластеры из 2-3 молекул диоксана, что согласуется с экспериментальными данными по рассеянию рентгеновских лучей [4]. Силовое поле OPLS-AA/CM1A демонстрирует менее выраженную сеть молекул диоксана при мольных долях ≥ 0.20.

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

**Литература**

1. Bakulin I. K. et al. Molecular-level insights to structure and hydrogen bonds network of 1, 4-dioxane aqueous solution // J. Mol. Liq. 2024. Vol. 393. P. 123523.

2. 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.

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. 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.

5. Hernandez-Perni G. et al. Detection of percolation phenomena in binary polar liquids by broadband dielectric spectroscopy // Int. J. Pharm. 2005. Vol. 291(1-2). P. 197-209.

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