

РАСЧЕТ ПРОЦЕССА ГЛОБУЛООБРАЗОВАНИЯ И РАДИУСА ГИРАЦИИ ПММА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кох Д.¹, Шабанова О.В.², Шабанов А.В.³

- ¹) Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», г. Красноярск, Россия
²) Институт космических технологий ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск, Россия
³) Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, г. Красноярск, Россия
 E-mail: diter.koh@gmail.com

CALCULATION OF GLOBULE FORMATION PROCESS AND RADIUS OF GYRATION OF PMMA BY MOLECULAR DYNAMICS STUDY

Kokh D.¹, Shabanova O.V.², Shabanov A.V.³

- ¹) Federal Research Center "Krasnoyarsk Science Center of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences", Krasnoyarsk, Russia
²) Institute of Space Technologies FRC KSC SB RAS, Krasnoyarsk, Russia
³) Kirensky Institute of Physics of the Siberian Branch of the RAS, Krasnoyarsk, Russia

The paper studied how the dispersion medium's viscosity affects the polymethyl methacrylate molecule's gyration radius using different mixtures. Molecular dynamics in GROMACS showed that as the dispersion medium's viscosity increases, the polymer's gyration radius decreases.

Фотонный кристалл (ФК) - материал, структура которого характеризуется периодическим изменением показателя преломления в пространстве. Его диэлектрические свойства меняются периодически в одном, двух или трех измерениях с характерным пространственным масштабом порядка оптической длины волны [1].

В работах, посвященных синтезу ФК [2, 3], была показана возможность их получения на основе монодисперсных сферических частиц полиметилметакрилата (ПММА). Монодисперсные или субмикронные частицы - частицы, которые обладают одинаковыми размерами, формами и внутренней структурой. Они были получены при помощи безэмульгаторной полимеризации. В качестве инициатора полимеризации использовался 2,2'-азобисдемитилпропионамид, который обеспечивает прохождение реакции без побочных негативных эффектов [4].

Большим интересом является возможность варьировать период получаемой фотонно-кристаллической структуры для различных целей. Этого можно добиться путем изменения диаметра сферических частиц ПММА во время их синтеза. Один из способов влияния на диаметр таких частиц – изменение динамической вязкости среды, в которой проходит синтез [5, 6].

Для проведения расчетов созданы три бокса объемом $V_{\text{box}} = 20 \text{ nm}^3$. Молекула ПММА создана длиной в 22 звена. Топология рассчитана с использованием методов DFT(B3LYP/6-31G*). Для имитации дисперсионной среды в боксы помещались молекулы полимера, воды и компонентов.

Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием GROMACS. Проведены релаксации в NVE, NVT и NPT ансамблях. Моделирование в ансамблях NVT и NPT длилось 300 пикосекунд, основной расчет - 10 наносекунд.

В ходе расчетов также был исследован радиус гирации ПММА. Он представляет собой квадрат соотношения момента инерции системы к её массе и характеризует «расплывчатость» объекта в пространстве. После предварительной релаксации трех систем (водно-глицериновая среда, водно-ацетоновая среда, водно-демитилсульфоксидная среда), начальный радиус гирации цепей полимера был приблизительно одинаков, где максимальная разница наблюдается между случаями среды с добавлением ДМСО и глицерина.

На основе результатов, полученных в работе [5], которые показали обратную зависимость между диаметром сферических частиц ПММА и вязкостью дисперсионной среды, и результатов молекулярно-динамических расчетов, демонстрирующих влияние вязкости дисперсионной среды на радиус гирации цепи ПММА, был построен график, изображенный на рисунке 1.

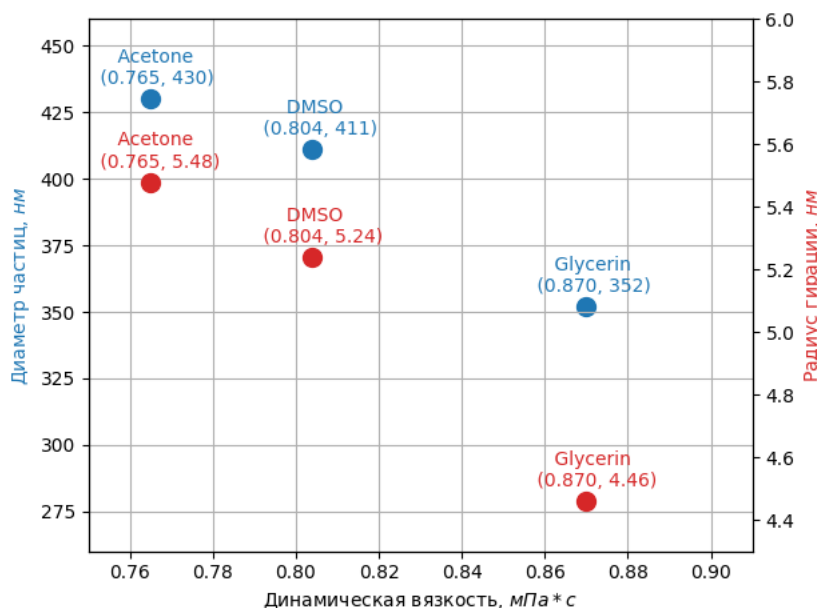


Рис. 1. Зависимость экспериментальных значений диаметра сфер ПММА (синий цвет) [5] и расчётных значений радиуса гирации цепей ПММА (красный цвет) от вязкости дисперсионной среды

Анализируя данные на рисунке 1, можно наблюдать некоторую корреляцию, между радиусом гирации ПММА и диаметром субмикронных сферических частиц ПММА. На основании такой корреляции предполагается, что больший

радиус гирации полимера ведет к образованию глобул большего диаметра, а соответственно и к образованию субмикронных сферических частиц ПММА большего диаметра. По такой же логике меньший радиус гирации ведет к образованию глобул меньшего размера, следовательно, и субмикронные сферические частицы ПММА будут иметь диаметр меньше.

2. Шабанова О.В, Шабанов А.В, Немцев И.В., Сибирский журнал науки и технологий, 4, 201-205, (2011)
3. Nemtsev I.V, Shabanova O.V, Shestakov N.P, Ivanenko A.A, Cherepakhin A.V, Zyryanov V.Ya, Journal of Physics: Conference Series, 1745, 12024, (2021)
4. Шабанов А.В, Шабанова О.В, Коршунов М.А., (Коллоидный журнал, 76, 120-126, (2014)
5. Nemtsev I.V, Shabanova O.V, Tambasov I.A, Ivanenko A.A, Cherepakhin A.V, Shestakov N.P, Zyryanov V.Ya., Journal of Structural Chemistry, 62, 641-650, (2021)
6. Nemtsev I.V, Shabanova O.V., Journal of Siberian Federal University, 14, 178-185, (2021)