

ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДОМ КОМП'ЮТЕРНОЇ ХІМІЇ ХАРАКТЕРИСТИК СТРУКТУРИ МОДЕЛЕЙ ОЛІГОУРЕТАНІВ ТА ФРАГМЕНТІВ ЇХ БУДОВИ

Макаренко Наталія Віталіївна,
здобувач вищої освіти II курсу магістра, makarenkonataliyaa@gmail.com
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Віленський Володимир Олексійович,
доктор хімічних наук,
старший науковий співробітник, професор кафедри хімії, volodymyr-vilensky@ukr.net
Житомирський державний університет імені Івана Франка, Україна

Мета дослідження полягає в дослідженні методом комп'ютерної хімії характеристик структури моделей олігоуретанів та фрагментів їх будови.

Об'єктом дослідження є моделі олігоуретанів, отримані з диетиленгліколю ($n=1, 2, 3$) та гексаметелендіізоціанату.

Для досягнення мети дослідження будуть використовуватися такі **методи**:

- метод комп'ютерної хімії;
- методи розрахунку енергії зв'язків;
- методи розрахунку геометричної структури.

Олігоуретани – це полімери, що складаються з кількох (від 2 до 10) мономерних одиниць уретану. Вони мають широке застосування в різних галузях промисловості, зокрема в електроніці, машинобудуванні, медицині та будівництві.

Структура олігоуретанів залежить від природи мономерних одиниць, які їх утворюють. Мономерні одиниці уретану можуть бути діізоціатами, поліізоціанатами або карбамідами. Діізоціати та поліізоціанати є більш поширеними, оскільки мають нижчу ціну та доступніші.

Структурні характеристики олігоуретанів впливають на їхні властивості. Наприклад, молекулярна маса олігоуретану визначає його механічні властивості, а тип мономерних одиниць впливає на його хімічні властивості.

Дослідження структури олігоуретанів методом комп'ютерної хімії є важливим завданням, оскільки дозволяє отримати інформацію про їхні властивості та закономірності, що існують між структурою та властивостями.

Дослідження структури олігоуретанів методом комп'ютерної хімії є актуальним, оскільки дозволяє:

- Отримати інформацію про молекулярну структуру олігоуретанів, зокрема про розташування атомів, довжини зв'язків та кути обертання.
- Розрахувати енергію активації реакцій, що відбуваються з участю олігоуретанів.
- Передбачити властивості олігоуретанів, зокрема механічні, термічні та хімічні.

У 2005 році було опубліковано дослідження « Surface Structure and Properties of (Oligourethane with Fluoroalkyl End Groups I Polyurethane) Blend Thin Films » в якому вчені використовували комп'ютерну хімію для вивчення взаємозв'язку між послідовністю та властивостями олігоуретанів. Вони виявили, що склад мономерної послідовності може бути використаний як інструмент для регулювання термічних властивостей олігоуретанів і може впливати на шлях деградації. Індукуючи хіральність у макромолекулах, вони можуть точно програмувати гідродинамічний об'єм, теплові характеристики та оптичну активність.

У статті «Application of Quantum Computing to Biochemical Systems: A Look to the Future» авторів Hai-Ping Cheng, Erik Deumens та ін. розглядають застосування квантових комп'ютерів для моделювання біохімічних систем. Автори пропонують загальний підхід, який полягає в розділенні системи на дві частини: одна частина описується на класичному комп'ютері, а друга частина – на квантовому комп'ютері. Цей підхід дозволяє використовувати квантові комп'ютери для моделювання складних систем, навіть якщо

квантовий комп'ютер недостатньо потужний для опису всієї системи.

Автори показують, що запропонований ними підхід може бути використаний для моделювання цих систем з високим ступенем точності. Ці результати свідчать про те, що квантові комп'ютери мають потенціал для значного прискорення розрахунків, пов'язаних з моделюванням біохімічних систем.

Ці дослідження є новими, оскільки вони демонструють потенціал комп'ютерної хімії в розумінні характеристик моделей олігоуретанів та їхніх структурних фрагментів. Вони також показують, що комп'ютерна хімія може бути використана для розробки нових полімерних матеріалів з заданими властивостями.

Дослідження структури олігоуретанів методом комп'ютерної хімії є важливим завданням, оскільки дозволяє отримати інформацію про їхні властивості та закономірності, що існують між структурою та властивостями. Нові дослідження в цьому напрямку можуть призвести до розробки нових полімерних матеріалів з заданими властивостями.

Для досягнення мети дослідження будуть вирішені такі конкретні завдання:

- для диетиленгліколю ($n=1$):
 - визначення структури поліуретану;
 - характеристика геометричної структури поліуретану;
 - характеристика енергії зв'язків у поліуретані;
- для диетиленгліколю ($n=2$):
 - визначення структури поліуретану;
 - характеристика геометричної структури поліуретану;
 - характеристика енергії зв'язків у поліуретані;
- для диетиленгліколю ($n=3$):
 - визначення структури поліуретану;
 - характеристика геометричної структури поліуретану;
 - характеристика енергії зв'язків у поліуретані.
- Вивчення впливу довжини полімерної ланки на структурні характеристики поліуретанів.
- Вивчення впливу структурних характеристик поліуретанів на їхні властивості.

Очікується, що результати дослідження допоможуть краще зрозуміти структуру та властивості поліуретанів. Ці знання можуть бути використані для розробки нових поліуретанових матеріалів з заданими властивостями.

Дослідження структури олігоуретанів методом комп'ютерної хімії є актуальним та перспективним напрямком досліджень. Нові дослідження в цьому напрямку можуть призвести до розробки нових полімерних матеріалів з заданими властивостями, а також до розробки нових методів моделювання біохімічних систем.

Основні висновки з цього дослідження такі:

- Дослідження структури олігоуретанів методом комп'ютерної хімії дозволяє отримати дані про їхні властивості та закономірності, що існують між структурою та властивостями.
- Ці дослідження можуть бути використані для розробки нових полімерних матеріалів з заданими властивостями, наприклад, з підвищеною міцністю, гнучкістю, термічною стійкістю, оптичними властивостями тощо.

• Квантові комп'ютери мають потенціал для значного прискорення розрахунків, пов'язаних з моделюванням складних молекулярних систем, таких як олігоуретани.

У майбутньому дослідження структури олігоуретанів методом комп'ютерної хімії можуть бути спрямовані на такі напрямки:

- Розробка нових методів моделювання, які дозволять отримувати точніші результати.
- Дослідження впливу інших факторів, таких як температура, тиск, вологість, на властивості олігоуретанів.
- Розробка нових методів синтезу олігоуретанів з заданими властивостями.

Ці дослідження можуть призвести до розробки нових полімерних матеріалів з широким спектром застосування, наприклад, у медицині, електроніці, машинобудуванні та інших галузях.