

## ДОСЛІДЖЕННЯ МЕТОДАМИ КОМП'ЮТЕРНОЇ ХІМІЇ: ММ+ ТА MD ОЛІГОМЕРНИХ ПРОДУКТІВ ЕТЕНУ ТА ВІНІЛХЛОРИДУ N=10

*Ванельчук І.М., Віленський В.О.*

Житомирський державний університет ім.І.Франка, [ira.vanelchuk2003@gmail.com](mailto:ira.vanelchuk2003@gmail.com)

Встановлення структури та характеристик матеріалів – ключове завдання в галузі хімії, виконання якого сприяє синтезу нових сполук з певними корисними властивостями. Сучасний розвиток суспільства активно впливає на всі сфери, зокрема на хімію, де нові інформаційні технології та комп'ютерні засоби стали важливим інструментом для розв'язання практичних завдань. Використання прогресивних комп'ютерних технологій дозволяє не лише відтворювати інформацію про різні сполуки, а й моделювати хімічні реакції та прогнозувати їх властивості. Ефективність таких комп'ютерних прогнозів зазвичай становить близько 90%, а постійне удосконалення програмного забезпечення показує значне збільшення цього показника [1].

Метою даної роботи є дослідження методами комп'ютерної хімії: ММ+ та MD олігомерних продуктів етену та вінілхлориду. Виконання практичних завдань проводились в програмному забезпеченні HyperChem. Програма HyperChem призначена для відображення молекулярних структур у дво- та тривимірному форматах і відноситься до категорії програмних редакторів хімічних структур. Вона надає можливість відтворювати молекулярні структури на площині, моделювати рівняння реакції, надавати назви молекулам і конвертувати їх у тривимірні моделі Chem3D [1]. Молекулярне моделювання передбачає розробку математичних моделей молекул, які можна використовувати для прогнозування та інтерпретації їхніх властивостей. Існує два типи молекулярного моделювання – молекулярна механіка і квантова механіка.

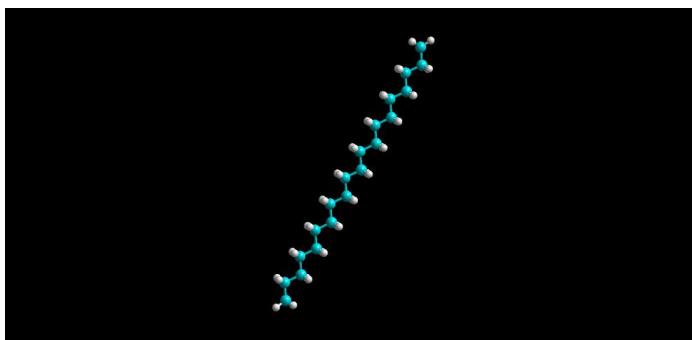
Молекулярна механіка представляє молекулу як групу зв'язаних атомів. Методи молекулярної механіки розглядають зв'язки як пружини, які можна розтягувати, стискати, згинати під валентними кутами та скручувати під торсійними кутами. Також розглядаються взаємодії між незв'язаними атомами. Суму всіх цих сил називають силовим полем молекули. Силове поле молекулярної механіки будують і параметризують шляхом порівняння з кількома молекулами. Надалі силове поле можна використовувати для інших молекул, подібних до тих, для яких воно було параметризовано. Для розрахунку молекулярної механіки обирається силове поле та встановлюються відповідні значення молекулярної структури (природні довжини зв'язків, кути тощо). Потім структура оптимізується шляхом поступової зміни, щоб мінімізувати енергію деформації та поширити її на всю молекулу. Ця мінімізація відбувається на порядки швидше, ніж квантово-механічний розрахунок на еквівалентній молекулі. етрії та теплоти утворення молекул, для яких доступне силове поле. Наприклад, це зручний спосіб порівняти різні конформації однієї молекули.

Метод молекулярної динаміки (MD) розв'язує рівняння руху Ньютона для молекулярної системи, результатом чого є траєкторії для всіх атомів у системі. Цей метод використовує функцію потенціальної енергії та пов'язане силове поле для відстеження переміщення атомів у молекулі протягом певного періоду часу, за певної температури та певного тиску. Розрахунок руху виконується через окремі та короткі інтервали часу, а швидкість обчислюється для кожного положення атома, що, у свою чергу, використовується для розрахунку прискорення. Моделювання також можна проводити з різними температурами, щоб отримати різні сімейства конформаційних ізомерів. При більш високих температурах можлива більша кількість конформерів і стає можливим подолання енергетичних бар'єрів [2,3].

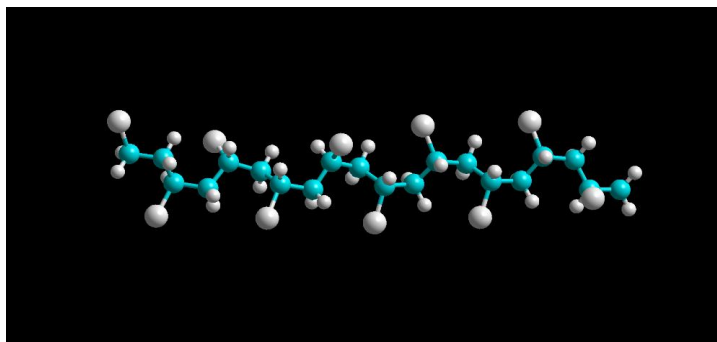
Досліджувались олігомерні продукти етену та вінілхлориду  $n=10$ . Були створені моделі даних представників, проведена оптимізація їх структур за допомогою ММ+ та проведені динамічно-механічні дослідження при температурах  $T_1 = 275\text{K}$ ;  $T_2 = 325\text{K}$ ;  $T_3 = 375\text{K}$ . Олігоетилен відноситься до коротких полімерних ланцюгів, що складаються з

мономерних ланок етилену. Олігомер неполярний, так як відсутні функціональні групи, крім одинарних зв'язків С-С, гнучкий через відсутність сильних міжмолекулярних сил, має низьку температуру плавлення, хімічно інертний. Зазвичай зустрічається в повсякденних пластмасах, таких як пакети, контейнери та плівки.

Оліговінілхлорид є продуктом полімеризації вінілхлориду ( $\text{CH}_2=\text{CHCl}$ ). Вінілхлорид помітно відрізняється від етилену: Сl утворює полярні ковалентні зв'язки з карбоном, що призводить до більш поляризованої структури. Сl дуже електронегативний, що призводить до сильної внутрішньої міжатомної взаємодії. Ці взаємодії сприяють тому, що оліговінілхлорид має вищу жорсткість та температуру плавлення, підвищену хімічну стійкість та більшу стабільність. Даний олігомер знаходить застосування у виробництві ПВХ (полівінілхлориду): зустрічається в трубах, кабелях і будівельних матеріалах, вінілових покриттях [4].



**Рис. 1.** Оптимізована структура олігомерного продукту етену.



**Рис. 2.** Оптимізована структура оліговінілхлориду.

Попередні результати досліджень дозволили встановити, що енергія оптимізації ланцюгу олігомерного продукту етену  $E_{\text{опт}} = 17,992 \text{ kcal/mol}$  вдвічі менша за  $E_{\text{опт}} = 43,114 \text{ kcal/mol}$  олігомерного продукту вінілхлориду, що підтверджує роль атома Сl, який підсилює внутрішні взаємодії, тоді як гомогенний олігоетилен залишається неполярним. Хлор служить потужним засобом для модифікації поліолефінів. Розуміння впливу даного атому допомагає розробляти матеріали з бажаними характеристиками. Незалежно від того, підвищує жорсткість чи забезпечує гнучкість, хлор відіграє ключову роль у модифікації поліолефінів на олігомерних моделях.

1. Практикум з комп'ютерної хімії. Навчальний посібник / О.С. Бондар Чернігів: ЧНПУ, 2016. – 68 с.
2. Prof. Dr. Wilfred F. van Gunsteren, Prof. Dr. Herman J. C. Berendsen. Computer Simulation of Molecular Dynamics: Methodology, Applications, and Perspectives in Chemistry
3. Modeling Molecular Structures With Hyperchem: Computational Chemistry Laboratory.
4. Kiyoshi Endo, Synthesis and structure of poly(vinyl chloride)