

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДНОГО РАСТВОРА ПОЛИЭТИЛЕНОКСИДА МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

© Балабанян Артём Гургенович,^{1*} Мазо Михаил Абрамович,² и Ронова Инга Александровна³

¹Кафедра физики полимеров и кристаллов. Физический факультет. Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова. Воробьевы Горы. г. Москва 117234. Россия. Тел: (095) 469-0044. E-mail: balab@polly.phys.msu.su

²Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской Академии Наук.
Ул. Вавилова, 28. г. Москва 119991. Россия.

³Институт химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской Академии Наук. Ул. Косыгина, 4. г. Москва 117977. Россия.
E-mail: ron@pmc.ineos.ac.ru

*Ведущий направление; [†]Поддерживающий переписку

Ключевые слова: полиэтиленоксид, структура водных растворов.

Резюме

В работе рассматривается олигомерная цепь ПЭО длиной в шесть мономерных звеньев C_2H_4-O , с общей химической формулой $CH_3[C_2H_4-O]_6CH_3$. ПЭО помещается в водный раствор, состоящий из 850-ти молекул воды. Используется "мягкая" модель воды, в которой изменяется внутримолекулярная геометрия. Система рассматривается в кубической ячейке с периодическими граничными условиями. Электростатические взаимодействия учитываются с помощью метода Эвальда. Расчеты проводятся при различных температурах в диапазоне от 275К до 330К.

Показано, что взаимодействие растворителя с олигомерной цепочкой ПЭО приводит к стабилизации торсионного угла около C-C связи рядом с *транс* конформацией. Наблюдалось различие величин углов внутреннего вращения вокруг C-C связи между концевыми и центральными участками олигомерной цепи.

Анализ структурно-динамических свойств ближайшего водного окружения цепи ПЭО позволяет предположить наличие спирали (полукольца) из молекул воды вдоль основной полимерной цепи, стабилизирующей конформацию полимера в растворе.