

2. Room temperature operated ammonia gas sensor using polycarbazole Langmuir–Blodgett film / Vibha Saxena [et al.] // *Sensors and Actuators B Chemical*. – 2005. – V. 107. – P. 277–282.

3. Electrical transport properties characterization of PVK (poly N-vinylcarbazole) for electroluminescent devices applications / P. D'Angelo [et al.] // *Solid-State Electronics*. – 2007. – V. 51. – P. 123–129.

4. Tanami G. / Thin Nanocomposite Films of Polyaniline/Au Nanoparticles by the Langmuir–Blodgett Technique / G. Tanami, V. Gutkin, D. Mandler // *Langmuir*. – 2010. – V. 26, № 6. – P. 4239–4245.

5. Сенсорные слои полиметилметакрилата для емкостных датчиков анализа содержания катионов тяжелых металлов в воде / Д. В. Сапсалёв [и др.] // *Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. хім. навук*. – 2024. – Т. 60, № 1. – С. 81–88.

УДК 004.942, 532.64

МОДЕЛИРОВАНИЕ СМАЧИВАЕМОСТИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛИМЕРОВ ВОДОЙ

Трухан Р. Э.¹, Маханёк А. А.¹, Лапицкая В. А.^{1,2}, Чижик С. А.^{1,2}, Кузнецова Д. И.²

¹Институт тепло- и массообмена имени А. В. Лыкова НАН Беларуси

²Белорусский национальный технический университет

Минск, Республика Беларусь

Аннотация. Представлен обзор, посвященный молекулярно-динамическому моделированию смачиваемости полимерных материалов водой и исследованию механических свойств полимеров с применением пакета GROMACS и использованных при этом силовых полей и инструментов формирования топологических данных.

Ключевые слова: полимеры, смачиваемость, молекулярная динамика.

MODELING OF POLYMER SURFACE WETTABILITY WITH WATER

Trukhan R.¹, Makhaniok A.¹, Lapitskaya V.^{1,2}, Chizhik S.^{1,2}, Kuzniatsova D.²

¹A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of NAS of Belarus

²Belarusian National Technical University

Minsk, Republic of Belarus

Abstract. This review is devoted to molecular dynamics modeling of wettability of polymeric materials by water and the study of mechanical properties of polymers using the GROMACS package, with the force fields and topological data generation tools used in this case.

Key words: polymers, wetting, molecular dynamics.

Адрес для переписки: Трухан Р. Э., ул. П. Бровки, 15, г. Минск 220072, Республика Беларусь

e-mail: ruslan.trukhan@mail.ru

Формирование нанопленок на структурированных твердых поверхностях предполагает измерение краевого угла смачиваемости (КУС) поверхности пленки водой для контроля эффекта от модификации гидрофильно/гидрофобных свойств подложки. Кроме того, методом атомно-силовой спектроскопии измеряются также упругие и адгезионные свойства сформированных пленок. Трудоемкость и продолжительность таких экспериментов побуждает привлечение метода молекулярной динамики для количественной оценки интересующих параметров и выбора оптимальных условий модификации физико-химических свойств поверхности подложки.

Одним из распространенных пакетов молекулярно-динамического (МД) моделирования является GROMACS [1]. Хотя данный пакет ориентирован на исследование органических молекул, множество работ демонстрируют возможность успешного моделирования в нем процессов в искусственных полимерных системах. Наш выбор в пользу GROMACS обусловлен его высокой производительностью [2].

Целью данной работы является обзор публикаций, в которых данный пакет применялся для изучения различных физико-химических и механических свойств искусственных полимеров.

Публикаций, посвященных исследованию смачиваемости и механических свойств полимеров методом МД-моделирования с применением пакета GROMACS немного и, зачастую, они не содержат информацию о программных инструментах, при помощи которых авторы таких публикаций формировали файл топологии. В случае искусственных полимеров создать такой файл средствами GROMACS весьма затруднительно. Поэтому мы акцентируем внимание на работах, в которых имеется информация о полезных для решения подобной задачи скриптах и WEB-ресурсах, а также применявшихся для моделирования силовых полей.

Как правило, МД-моделирование смачиваемости полимеров водой не ограничивается определением КУС, а включает также изменения условий или факторов, влияющих на величину этого угла. Так, в работе [3] изучалось влияние рифле-

ния поверхности слоев полиэтилена (ПЭ) и поливинилхлорида (ПВХ) на КУС. Сложный контакт (при котором капля лежит на вершине неровностей поверхности) легче достигается на рифленых поверхностях ПЭ, чем на соответствующих поверхностях ПВХ. В случае ПВХ вода заполняет канавки более глубоко из-за более слабой гидрофобности поверхности ПВХ. В обоих случаях контактный угол в направлении канавок был меньше, чем в перпендикулярном направлении. Разница между двумя углами уменьшалась с увеличением размера капли воды.

Динамика смачивания твердой поверхности определяется межфазными реакциями на молекулярном уровне. В работе [4] динамический угол контакта и деформация линии контакта капли воды на ограниченной поверхности аморфного политетрафторэтилена (ПТФЭ) были исследованы с помощью МД-моделирования. В результате была подтверждена экспоненциальная модель развития области контакта в процессе смачивания, определены коэффициенты вязкого и молекулярного трения, предложено безразмерное число N_l для количественной оценки относительных колебаний скорости линии контакта.

Изучению смачивания целлюлозы водой и несколькими органическими жидкостями методом МД-динамики посвящена работа [5]. Капля жидкости задавалась цилиндрической формы. Была обнаружена сильная связь между углом контакта и поверхностным натяжением смачивающей жидкости.

Влияние химического состава и топологии линейных и трехмерных поликарбонатных полиуретанов, модифицированных полиэтиленгликолем (ПЭГ) с одинаковым количеством гидрофильных групп ПЭГ на поверхности, исследовалось МД-методом в работе [6]. Было обнаружено супергидрофильное поведение линейной топологии. Моделирование подтвердило, что более высокая гибкость ПЭГ в линейной топологии приводит к большей миграции ПЭГ к границе раздела полимера и воды, а диффузия воды в эту область приводит к лучшему экранированию нижних гидрофобных (поликарбонатных) сегментов.

Краевой угол смачивания водой поверхности полимера, а также силовое поле и применявшийся в упомянутых выше работах программный инструмент для построения файла топологии представлены в таблице 1.

С применением пакета GROMACS возможно определение механических свойств полимеров. Так, в работе [7] исследованы реакции полукристаллического полимера ПЭ при наноиндентировании и были обнаружены сильные зависимости его механических свойств от кристалличности. Использовалось диссоциативное силовое поле [8].

Таблица 1 – Результаты и средства МД-моделирования смачиваемости полимеров в научных работах

Ссылка	Полимер	КУС, °	Силовое поле / инструмент для формирования файла топологии
[3]	ПЭ, ПВХ	112–135 0–96	PCFF/ Cerius2
[4]	ПТФЭ	110,6	OPLS-AA/*
[5]	Целлюлоза	11,6; 15,6**	CHARMM36/ нет информации
[6]	ПЭГ	50	Martini-3/PolySmart

*Параметры связанного и несвязанного взаимодействия представлены в [4] детально в виде таблицы.

**Модели воды SPC/E и TIP4P, соответственно

Примером применения МД-моделирования коэффициента Пуассона упругого полимерного материала (вспененный полистирол) является работа [9].

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке ГПНИ «Конвергенция – 2025» (задание № 3.03.3).

Литература

- GROMACS: fast, flexible, and free / D. van der Spoel [et al.] // Journ. of Comput. Chem. – 2005. – V. 26, № 16. – P. 1701–1718.
- Loeffler, H. Large biomolecular simulation on HPC platforms II. DL POLY, Gromacs, LAMMPS and NAMD [Electronic resource] / H. H. Loeffler, M. D. Winn // ResearchGate. – Mode of access: <https://www.researchgate.net/publication/315786259>. – Date of access: 29.09.2024.
- Hirvi, J. Wetting of nanogrooved polymer surfaces / J. Hirvi, A. Pakkanen // Langmuir. – 2007. – V. 23. – P. 7724–7729.
- Zhao, L. Molecular dynamics study of contact line dynamics of water droplets on PTFE surfaces / L. Zhao, J. Cheng // Proceedings of the ASME 2016 International Mechanical Engineering Congress and Exposition: IMECE2016-65941. Nov. 11–17, 2016, Phoenix, Arizona, USA. – 2016. – V. 50619. – P. 1–10.
- Sridhar, A. S. Wetting of native and acetylated cellulose by water and organic liquids from atomistic simulations / A. S. Sridhar, L. A. Berglund, J. Wohlert // Cellulose. – 2023. – V. 30. – P. 8089–8106.
- Molecular insight into the effect of polymer topology on wettability of block copolymers. The case of amphiphilic polyurethanes / A. Mirzaalipour [et al.] // Langmuir. – 2024. – V. 40. – P. 62–71.
- Fritz, S. Considering semi-crystallinity in molecular simulations of mechanical polymer properties – using nanoindentation of polyethylene as an example / S. Fritz // Computer Methods in Materials Science. – 2021. – V. 21, № 1. – P. 35–50.
- Development of dissociative force field for all-atomistic molecular dynamics calculation of fracture of polymers / K. Fujimoto [et al.] // Journ. of Comput. Chem. – 2019. – P. 1–6.
- Moga, S. A. Developing a novel algorithm for the computation of Poisson's ratio using molecular dynamics for polymers / S. A. Moga, N. Goga, A. Hadar // U. P. B. Sci. Bull., Series B. – 2016. – V. 78, Iss. 1. – P. 129–136.