

Д. В. Ежов, асп.,  
А. С. Горобцов, д-р техн. наук,  
А. Н. Гайдадин, канд. техн. наук, доц.  
(ФГБОУ ВО «ВолГТУ», г. Волгоград, Российская Федерация);

## **МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ПРОГНОЗЕ СОВМЕСТИМОСТИ ПОЛИМЕРОВ ДЛЯ СОЗДАНИЯ СМЕСЕВЫХ ПОЛИМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ**

Отрасль аккумуляторных батарей в последние годы продолжает активно развиваться для удовлетворения усложняющихся технических требований, пожеланий клиентов и в целях повышения безопасности. Текущие тренды повышения пожаробезопасности батарей связаны с переходом на твёрдотельные аккумуляторы, не содержащие в составе жидкого электролита, в роли которого выступают пожароопасные органические растворители.

В качестве альтернативы предлагают использовать электролиты, матрицей которых являются полимеры, отличающиеся пожаробезопасностью. Однако электролиты состава полимер-соль (генератор ионов) при всех своих положительных качествах не позволяют добиться приемлемой проводимости, порядка  $10^{-4}$ – $10^{-3}$  См/см, что связано с затруднённым транспортом катионов металла соли в полимерной матрице.

Решением для повышения проводимости полимерных электролитов стало создание смесевых полимерных матриц из двух полимеров, содержащих электроотрицательные группы. При рациональном подборе смеси полимеров удавалось достичь удовлетворительных показателей проводимости [1, 2].

Для сокращения времени на разработку подобных смесей ранее нами был предложен прогноз совместимости полимеров квантовохимическими методами анализа (КХА) в противовес традиционному методу прогноза по параметрам растворимости Гильдебранда, основанному на расчёте лишь одного полимерного звена по табличным значениям энергетических инкрементов отдельных атомов и атомных группировок [3, 4].

Использование расчётных моделей, основанных на сегментах Куна полимеров, позволило учитывать их сегментарную подвижность и структуру, что повышает точность расчёта. Однако данный метод является требовательным к ресурсам компьютера и требует значительное время на осуществление расчёта – вплоть до нескольких суток. В последние годы всё шире распространяется использование методов молекулярной динамики в прогнозах растворимости и совме-

стимости [5–8] как для полимеров, так и для низкомолекулярных соединений. Такой подход является менее ресурсозатратным, более быстрым и позволяющим моделировать более длинные цепочки полимеров, что в свою очередь позволяет наиболее полно учитывать структуру полимеров и их сегментарную подвижность.

В работе моделировались полимерные пары: поливинилиденфторид-полиэтиленоксид (ПВДФ-ПЭО) – по 20 звеньев на модель, поливинилиденфторид-гидрированный бутадиеннитрильный каучук (ПВДФ-ГБНК) – по 5 звеньев на модель, поливинилиденфторид-полиметилметакрилат (ПВДФ-ПММА) – по 15 звеньев на модель, и поливинилиденфторид-полипропиленкарбонат (ПВДФ-ППК) – по 5 звеньев на модель, все с соотношением мономерных звеньев 1:1.

Для геометрической оптимизации каждого полимера использовались по две модели с заданным числом звеньев для учёта взаимодействий внутри полимера с использованием периодического бокса, далее они рассчитывались методом ММ+.

Количество звеньев для каждого полимера выбрано исходя из ограничения объёма периодического бокса в программе. После окончания расчёта полученные значения полных энергий полимеров, а также энергии изолированных мономерных звеньев при 298 К пересчитывались в параметры растворимости через плотность энергии когезии.

Результаты обработки полученных данных представлены в таблице.

**Таблица – Результаты обработки данных из метода молекулярной динамики**

	Полная энергия системы, ккал/моль	Энергия изолированного звена, ккал/моль	Параметр растворимости, $(\text{кал}/\text{см}^3)^{0,5}$
ПВДФ (20 звеньев)	2439,83	75,02	3,25
ПВДФ (15 звеньев)	1837,36	75,02	2,79
ПВДФ (5 звеньев)	631,60	75,02	3,62
ПЭО (20 звеньев)	3325,87	99,09	3,46
ГБНК (5 звеньев)	2238,48	238,72	1,67
ПММА (15 звеньев)	5271,25	187,81	2,61
ППК (5 звеньев)	1148,93	157,16	2,82

Разница параметров растворимости для всех полимерных пар оказалась меньше 2  $(\text{кал}/\text{см}^3)^{0,5}$ , то есть метод показывает совместимость данных полимерных систем, что подтверждалось ранее расчётами с помощью квантовохимического метода анализа [3, 4].

В результате проведённых исследований показана возможность

использования метода молекулярной динамики для осуществления прогноза совместимости полимеров при разработке смесевых полимерных электролитов.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Improving Ion Conductivity in Polymer Blend Electrolytes by Tuning Microdynamics and Interfaces / X. Mei [et al.] // *ACS Applied Polymer Materials*. – 2023. – V. 5, № 11. – P. 9225–9235.

2. Yun S., Hwang I., Choi W. J., Kim S. Y. Composition-driven design of solid polymer electrolytes: effects of non-coordinating and coordinating polymers on ionic transport in PVDF-HFP/PEG blends // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2026. – № 10. – P. 3534–3546.

3. Ежов Д. В., Гайдадин А. Н., Климов В. В. Прогнозирование совместимости полимеров для полимерных электролитов полуэмпирическим квантовохимическим методом // *Известия Волгоградского государственного технического университета*. – 2024. – № 12 (295). – С. 109–117.

4. Ежов Д. В., Гайдадин А. Н., Климов В. В. Исследование зависимости проводимости смесевых полимерных электролитов от совместимости полимеров в композиции // *Известия ВолгГТУ. Сер. Химия и технология элементоорганических мономеров и полимерных материалов*. – 2025. – № 5 (300). – С. 81–87.

5. Morphing Simulations Reveal Architecture Effects on Polymer Miscibility / S. Shetty [et al.] // *Macromolecules*. – 2020. – V. 53. – № 21. – P. 9386–9396.

6. Molecular Dynamic and Dissipative Particle Dynamic Simulation on the Miscibility of NR/CR Blends / Y. Ma [et al.] // *Polymers*. – 2023. – V. 15. – № 856. – P. 1–14.

7. Prediction of miscibility in chlorinated polyethylene/poly(vinyl chloride) blends via atomistic molecular dynamics simulations / Z. Ma [et al.] // *RSC Advances*. – 2026. – V. 16. – № 1. – P. 916–930.

8. Yang J., Yang B., Li Y., Wang S. Study on Compatibility and low temperature Resistance of butadiene rubber/Butadiene Rubber Blends by Molecular Dynamics Simulation // *China Synthetic Rubber Industries*. – 2020. – V. 43. – P. 291–295.