



**II Коршаковская Всероссийская с
международным участием
конференция**

**«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»**

Программа и тезисы докладов

25-26 февраля 2021 г.

Москва

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ОТДЕЛЕНИЕ ХИМИИ И НАУК О МАТЕРИАЛАХ РАН
ИНСТИТУТ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
ИМ. А. Н. НЕСМЕЯНОВА РАН
НАУЧНЫЙ СОВЕТ РАН
ПО ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫМ СОЕДИНЕНИЯМ

**II Коршаковская Всероссийская
с международным участием конференция**

**«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ
ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»**

Программа и тезисы докладов

ISBN 978-5-6046000-0-9

25-26 февраля 2021 г.

Москва

ДИНАМИЧЕСКОЕ ФОРМИРОВАНИЕ МЕТАЛЛ-ПОЛИМЕРНЫХ КОНТАКТОВ: МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Сызганцева О.А.¹, Сызганцева М.А.¹

¹ Московский государственный университет, Химический факультет

E-mail: osyzgantseva@gmail.com

Формирование металл-полимерных контактов играет ключевую роль при создании композитных полимерных материалов для применения в фотовольтаике, медицине, катализе, процессах экстракции и разделения. Локальная структура таких контактов предопределяет как функциональные свойства полимерных композитов, так и их механическую и химическую стабильность. С развитием вычислительного материаловедения стало возможным динамическое моделирование процессов формирования таких контактов из первых принципов. В данной работе с помощью метода *ab initio* молекулярной динамики исследован механизм сшивки цепей полиметакриловой кислоты катионами Ca^{2+} [1]. Выявлены характеристические паттерны взаимодействия Са-полимер, включая тип, количество и длины связей Са–О, а также максимальное количество полимерных цепей, координируемых одним катионом Ca^{2+} . Найдены времена образования кальциевых контактов и спонтанного замещения молекул воды в первой координационной сфере кальция в пикосекундном диапазоне (Рис.1). Проведено сравнение с другими полимерами, включая полиакриловую кислоту и алгинат [2]. Полученные данные по микроструктуре Са контактов позволяют оптимизировать состав компонентов при получении гидрогелей.

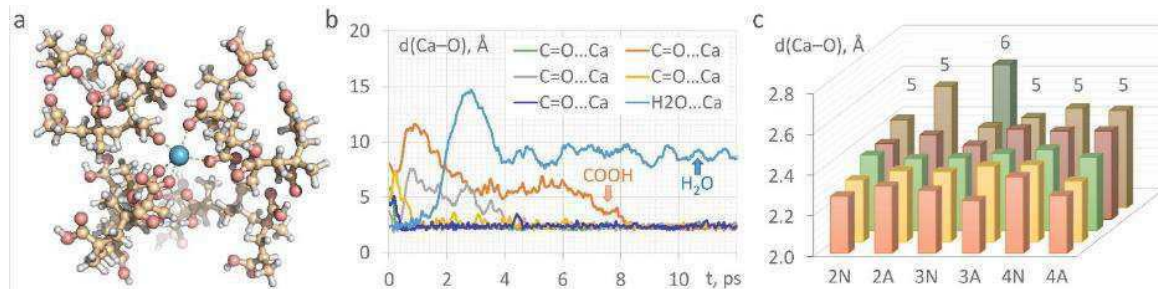


Рисунок 1. Локальная структура контактов Са – полимер: а – общая схема Са-сшивки цепей полиметакриловой кислоты; б – изменение расстояний Са – О в динамическом процессе образования Са сшивки; с – координационные числа и средние длины связей Са – О [1].

Благодарность

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература

- [1] M.A. Syzgantseva, O.A. Syzgantseva. Structural insights on the metal cross-linking of polymers from the first principles: Calcium – Polymethacrylic acid case study // *Polymer* – 2021. – Vol. 215 C. 123368
- [2] S. Yang, L. Peng, O.A. Syzgantseva, O. Trukhina, I.V. Kochetygov, A. Justin, D.T. Sun, H. Abedini, M.A. Syzgantseva, E. Oveisi, G. Lu, W.L. Queen. Preparation of Highly Porous Metal–Organic Framework Beads for Metal Extraction from Liquid Streams // *JACS* – 2020. – Vol. 142 C. 13415–13425

СОДЕРЖАНИЕ

5	Информация о спонсорах Конференции
6-16	Программа
17-42	Пленарные доклады
43-61	Устные доклады
62-120	Стендовые доклады

II Коршаковская Всероссийская с международным участием
конференция

«ПОЛИКОНДЕНСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ПОЛИМЕРЫ»

ISBN 978-5-6046000-0-9



ISBN 978-5-6046000-0-9

