

## АНАЛИЗ ЛОКАЛЬНОЙ ПОДВИЖНОСТИ ПОЛИИМИДОВ

Худобин Р.В., Мазо М.А., Балабаев Н.К.<sup>1</sup>

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, rvhudobin@gmail.com

<sup>1</sup>Институт математических проблем биологии РАН - филиал Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Пушкино Московской обл. balabaevnk@gmail.com

Ароматические полиимиды (АПИ) являются одним из наиболее перспективных газоразделительных материалов из-за их высокой газовой селективности, отличной термостойкости, высокой химической стойкости и хороших механических свойств. В связи с этим в последние годы идет активный поиск таких новых модификаций АПИ, которые сохраняют их замечательные физико-химические свойства и сочетают хорошую селективность с высокой проницаемостью. В рамках таких исследований недавно были синтезированы и охарактеризованы четыре новых полиэфиримиды [1] на основе диамина FMTBDA и диангидридов BPADA, 6FDA, OPDA, BTDA.

Для каждого из этих полимеров было проведено молекулярно-динамическое моделирование (МДМ): серия из 32 образцов, около 50000 атомов в течение 2.5 нс в NPT ансамбле. По результатам МДМ анализировалась локальная структура мономеров и динамика углов внутреннего вращения в основной цепи, которая оценивалась по амплитуде флуктуаций угла за все время модулирования. Полученные результаты позволяют утверждать, что влияние внутримолекулярной подвижности различных диангидридов (BPADA>ODPA>6FDA>BTDA) противоположно влиянию величины доступного свободного объема [2] (BTDA~6FDA>ODPA>BPADA). Сравнение с экспериментом позволило оценить вклад обоих факторов в коэффициент диффузии различных пенетрантов.

### Литература

1. N. Belov et al. New poly(ether imide)s with pendant di-tert-butyl groups// *Separation and Purification Technology* vol 216 (2019), pp 183-194.
2. M. Mazo et al. Structure and free volume of fluorine-containing polyetherimides // *Polymer* vol 258 (2022), 125318.