

Simulacije molekulske dinamike fluoriranega etanola

Katarina Kokalj^{1,2,3}, Matija Tomšič³ in Andrej Jamnik³

1. Odsek za teoretično fiziko, IJS, Ljubljana

2. Fakulteta za matematiko in fiziko, UL, Ljubljana

3. Fakulteta za kemijo in kemijsko tehnologijo, UL, Ljubljana

Fluorirani alkoholi spadajo med per- in polifluorirane spojine (PFAS), ki imajo na alkilni verigi vezanih več atomov fluora [1]. Ker je vez med fluorom in ogljikom ena izmed najmočnejših enojnih vezi v organski kemiji, so te spojine termično in kemijsko bolj stabilne od njihovih hidrogeniranih analogov [2]. Zaradi tega so se PFAS spojine včasih množično uporabljale, ne dolgo nazaj pa smo spoznali, da so škodljive tako za okolje kot tudi za zdravje ljudi. Dandanes ta skupina spojin predstavlja enega izmed obstojnih onesnaževal, zaradi njihovih edinstvenih kemijskih in fizikalnih lastnosti pa je sanacija PFAS spojin postavljena pred številne izzive [2, 3]. Poznavanje in razumevanje njihovih lastnosti je pri obravnavi te tematike zato ključno, pri tem pa so nam v izjemno pomoč simulacije molekulske dinamike (MD), saj omogočajo natančno modeliranje in preučevanje molekularnih sistemov na atomskem nivoju skozi izbrano časovno obdobje.

Simulacije MD smo izvedli na sistemu tekočega 2,2,2-trifluoroetanolu, naš cilj pa je bil ugotoviti, kako se različna polja sil obnašajo pri opisovanju lastnosti PFAS spojin. V ta namen smo obravnavali šest različnih polj sil: TRAPPE, GROMOS-UA, GROMOS-AA, CHARMM, AMBER in OPLS. Njihovo ustreznost pri napovedovanju strukturnih in dinamičnih lastnosti smo ovrednotili s pomočjo primerjave rezultatov izračunanega rentgenskega sipanja modelnih sistemov z eksperimentalnimi podatki, literaturne konformacijske analize in nekaterih termodinamskih količin.

[1] OECD (2021), Reconciling Terminology of the Universe of Per- and Polyfluoroalkyl Substances: Recommendations and Practical Guidance, OECD Series on Risk Management, No. 61, OECD Publishing, Paris.

[2] Kirsch, Peer: *Modern fluoroorganic chemistry: synthesis, reactivity, applications*. Wiley-VCH, 2004.

[3] S. C. E. Leung, D. Wanninayake, D. Chen, N.-T. Nguyen, Q. Li: Physicochemical properties and interactions of perfluoroalkyl substances (PFAS) - Challenges and opportunities in sensing and remediation. *Sci. Total Environ.* **2023**, 905, 166764.