

TARTU ÜLIKOOL
Füüsika-keemiateaduskond
Eksperimentaalfüüsika ja tehnoloogia instituut

JAANUS KARO

NaBH₄(EO)₂₀ amorfse struktuuri modelleerimine

Magistritöö

Juhendaja: vanemteadur, PhD. Alvo Aabloo

Tartu 2003

Sisukord

<u>Sisukord.....</u>	<u>3</u>
<u>Sissejuhatus.....</u>	<u>4</u>
<u>Ülevaade probleemist.....</u>	<u>5</u>
<u>Meetodid.....</u>	<u>6</u>
<u>Materjalid.....</u>	<u>8</u>
<u>Leitav jõuväli.....</u>	<u>8</u>
<u>Mudel.....</u>	<u>12</u>
<u>Kasutatud raud- ja tarkvara.....</u>	<u>13</u>
<u>Tulemuste analüüs.....</u>	<u>15</u>
<u>Järeldused.....</u>	<u>20</u>
<u>Kokkuvõte.....</u>	<u>21</u>
<u>Kasutatud kirjandus.....</u>	<u>22</u>
<u>Resume.....</u>	<u>24</u>

Sissejuhatus

Elektroaktiivseks polümeeriks (EAP) nimetatakse polümeere, mis muudavad oma kuju elektrilise stimulatsiooni peale. Eksisteerib teatud elektroaktiivseid polümeere, mis suudavad oma kuju muuta vastavalt neile rakendatud elektrivälja tugevusele. Esialgselt olid EAP-d võimelised muutma enda kuju suhteliselt vähesel määral, kuid 1990. alguse paiku arendati välja terve seeria uusi polümeere, mis suutsid juba suures ulatuses painduda. Sellega muutus ka huvi nende materjalide vastu suuremaks. Üldiselt suudavad EAP-d esile kutsuda deformatsiooni, mis on kuni kaks korda suurem kui jäik ja habras elektroaktiivne keraamika (EAC). Peale selle on EAP materjalid paremad kui metalli sulamitel baseeruvad materjalid.

Polümeeridel on palju kasulikke omadusi: nad on kerged, odavad, murdumisele vastupidavad ja painduvad. Enamgi veel, materjale saab valmistada kõikvõimalikes vormides ning nende omadusi kohandada vastavalt väga erinevatele nõudmistele. EAP puhul on võimalik geomeetriliselt disainida kõiksuguseid paindeid, venitusi kui ka kokku tõmbumisi. Samas töötavad need materjalid ka anduritena. Rakendades neile mehaanilist survet, on võimalik mõõta pinget, mis vastab deformatsioonile. Kuna elektroaktiivsete polümeeride omadused on väga sarnased bioloogilistele lihastele, siis on hakatud EAP-d kutsuma "tehislihasteks" [1]. EAP esimene eksperiment toimus 1880 aastal, kui kasutati kummiriba, mille üks ots oli kinnitatud ning teise otsa asetati raskus. Seejärel kummiriba laeti ning maandati, mille tulemusena kummi pikkus muutus. Keemiliselt stimuleeritavad polümeerid avastati umbe pool sajandit tagasi, kui demonstreeriti kollageeni niitide kokkutõmbumist ja venimist kokkupuutes vastavalt happe või leelise lahusega.

Üldiselt võib EAP-sid jagada kahte põhilisse kategooriasse aktiveerimis- mehhanismide järgi: elektroonsed ja ioonilised polümeerid. Elektroonsed polümeerid nagu elektrostaatiline, piezoelektriline ja ferroelektriline nõuavad tugevat elektrivälja, s.t. rohkem kui 150 V/m. On võimalik hoida tekitatud deformatsiooni pideva alalisvooluga, mistõttu on selliseid polümeere sobilik kasutada tööstuslikes rakendustes. Nad on väga tugevad ja kuna nad on nn. kuivad materjalid, siis saab kasutada neid tavakeskkonnas ilma suuremate piiranguteta. Ioonilised EAP materjalid nagu geelid, polümeer-metalli segud, juhtivad polümeerid, süsiniku nanotorukesed nõuavad oma tööks madalat, 1-5V pinget. Väljaarvatud juhtivad polümeerid, on need materjalid suure vedeliku sisaldusega ja seetõttu tuleb rakendada meetmeid nende kuivamise vältimiseks. Samuti ei suuda nad säilitada oma kuju alalispinge all ning nende eluea pikkus on tehniline probleem, mida pole veel edukalt suudetud lahendada. Samas on nimetatud materjalidel väiksem energiatarve, väiksem mass, väiksem müratase, raske detekteeritavus (väike metalli sisaldus). Nad on vastupidavad, odavad, neid on lihtne modifitseerida, nad on keskkonna sõbralikud, neil on kõrge vibratsiooni sumbuvus. Erinevalt elektromehaanilistest ajamitest on EAP-del suur hüsterees ning nende karakteristikud sõltuvad pinge sagedusest, amplituudist, õhuniiskusest ning temperatuurist ebalinearselt.

Ülevaade probleemist

Käesoleva töö kaugemaks eesmärgiks on uurida ioonsetes EAP-des toimuvaid difusiooni protsesse atomaarsel tasandil, kasutades selleks arvutiekspimenti ehk molekulaardünaamikat ja kvantkeemilisi arvutusi.

Meetodid

Kasutades modelleerimist on võimalik arvutada mingi aine füüsikalisi ja keemilisi parameetreid, süsteemi energiad, leida minimaalsele energiale vastav molekuli geomeetria. Seetõttu lihtsustab modelleerimine oluliselt materjalide uurimist, valmistamist kui ka leiutamist [2] [3] [4]. Arvutiekspereiment kui uurimise vahend, pakub mitmeid eeliseid. Võrreldes tavaliste eksperimentidega on võimalik uurida suuremat keemiliste ainete hulka. Arvutusteks kuluv aeg on üldjuhul sarnane reaalsetele katsete kuluva ajaga. Tänu arvutustehnika kiirele arengule ja hinna odavnemisele muutub modelleerimine reaalsete eksperimentidega võrreldes aina odavamaks.

Selleks, et kasutada mingisugust klassikalist, mitte kvantmehaanilist, simulatsiooni meetodit, tuleb kõigepealt leida uuritava ainele jõuväli (FF). Jõuvälja leidmiseks on kõige sagedasemateks teedeks kas molekulaardünaamilised või siis kvantkeemilised arvutused.

Jõuväli koosneb potentsiaalse energia funktsiooni parameetritest. Potentsiaalse energia funktsiooni komponentideks on keemilisi sidemeid sisaldavad osad ning sidemeid mitte sisaldavad osad. Vastavad funktsiooni parameetrid on valitud selliselt, et potentsiaalne energia kirjeldaks süsteemi sarnaselt kas vastavalt eksperimendi andmetele või kvantmehaaniliste meetodite tulemustega. Keemilisi sidemeid sisaldav potentsiaalse energia komponent näeb tavaliselt välja järgmiselt

$$E_{side} = \sum_{sidemed} k_r (r - r_0)^2 + \sum_{nurgad} k_\Theta (\Theta - \Theta_0)^2 + \sum_{dihedraal} \frac{V_n}{2} [1 + \cos(n\Phi - \Phi_0)],$$

kus k_r ja k_Θ on sideme valentsvõnkumiste ja nurgavõnke jõukonstandid. Esimene summa liige kirjeldab sideme pikkuste, teine nurga ja kolmas dihedraali osa. V_n on dihedraali nurga energiabarjäär. Kaugmõju ehk molekulidevahelist

interaktsiooni kirjeldatakse järgmise võrrandiga, milles kaks esimest summa liiget on 12-6 ehk Lennard-Jones'i potentsiaal ja viimane summa kirjeldab klassikalist Coulombi interaktsiooni

$$E_{mitte} = \sum_{i,j} \frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} - \frac{B_{ij}}{r_{ij}^6} + \sum_{i,j} \left[\frac{q_i q_j}{\epsilon r_{ij}} \right].$$

Jõuvälja kasutamine baseerub eeldusel, et sarnastes keemilistes kompleksides leitud jõuväli on peale kantav teistesse süsteemidesse.

Kui sobiv jõuväli on leitud, võib olemasolevat välja kasutada mitmete erinevate simulatsiooni meetodite peal, sealhulgas ka molekulaardünaamikaga (MD).

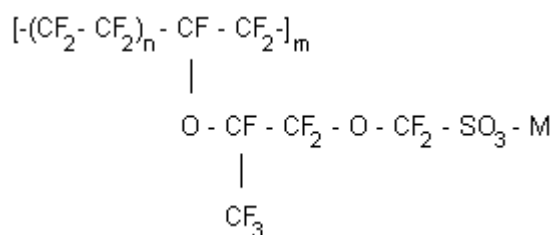
MD meetod on üks põhilistest ja praktikas kasutatavamatest simulatsiooni tehnoloogiatest suurte aatomite kogumite korral. MD on deterministlik meetod, mis jälgib iga osakese liikumist eraldi. Klassikaline MD püüab ennustada aatomite liikumisi, lahendades selleks Newtoni liikumisvõrrandeid kõigi osakeste jaoks. Enne simuleerimise algust pannakse paika kõikide aatomite kohta nende positsioonid, kiirused ja kiirendused. Liikumisvõrrandeid integreerides saame ajast sõltuva trajektoori funktsiooni, kus kiirendus on potentsiaalse energia tuletis jõuväljast kui funktsioon koordinaadist,

$$a = -\frac{1}{m} \frac{dV}{dr}.$$

Saadud võrrandid integreerime numbrilistelt [5].

Materjalid

Meid huvitavaks materjaliks oleme valinud Nafioni® [6], millesse lisatakse NaBH₄ ioone. Nafion moodustab poorse geeli, kus vee sisaldus on umbes 50 %. Tema keemilise struktuuri valemit näitab Joonis 1.



Joonis 1: Nafioni keemiline struktuur

Nafion on tuntud prootonjuht, mida kasutatakse väga laialdaselt metanooli toitega kütuseelementides [7].

Geelile lisatakse umbes 10% NaBH₄.

Hetkel toimub aktiivne uurimistöö Nafioni geeli jõuvälja arendamiseks. Sestap otsustasime paralleelselt arendada ja testida jõuvälja NaBH₄ tarbeks meie uurimisgrupi poolt korduvalt kasutatud ning väga hästi testitud polümeeri polüetüleenoksiidi (PEO). Nimetatud polümeer on polümeerne elektrolüüt.

Viimasel kahel aastakümnel on polümeerelektrolüütide vastu suurt huvi tuntud. PEO ehk (-CH₂-CH₂-O-)_n, kus ahela pikkus sõltub sünteesi tingimustest ja varieerub 200st kuni 10000 EO ühikuni. Aine leiab kasutamist polümeersetes akudes.

Leitav jõuväli

NaBH₄ tasakaalulise konformatsiooni ja osalaengute leidmiseks kasutati Gaussian98 nimelise tarkvara paketi B3LYP meetodit [8]. Saadud tulemused on esitatud Tabel 1.

B osalaeng (Mulliken)	H osalaeng (Mulliken)	B ja H vaheline kaugus (Å)
-0.097059	-0.225735	1.239

Tabel 1: DFT arvutuse tulemused

PEO sidemepikkused me fikseerime, et vahesammu suurendada, mistõttu on võimalik simuleerida pikemaid ajavahemikke. Sidemepikkuste fikseerimiseks kasutame SHAKE algoritmi [9]. PEO jõuvali on eelnevalt testitud [11] ja on leidnud ka kasutamist.

Siinkohal toome ära jõuvaljade lühikese kirjelduse. NaBH₄ puhul kasutame esimese lähendina nn. universaalset jõuvalja UFF [10].

Keemilise sideme potentsiaal on traditsiooniline harmooniline potentsiaal

$$U(r) = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2,$$

kus r_0 on tasakaaluline sideme pikkus ja k on jõukonstant. Tabel 2 sisaldab UFF abil arvutatud aniooni sidemete parameetreid

Aatomi tüübid		k [(kcal/mol)/Å ²]	r ₀ (Å)
B	H _B	436.305	1.239

Tabel 2: Aniooni keemilise sideme potentsiaali parameetrid

PEO nurga potentsiaali me lähendame samuti traditsioonilise harmoonilise võrrandiga:

$$U(\Theta) = \frac{k}{2}(\Theta - \Theta_0)^2,$$

kus Θ_0 on tasakaalulise oleku nurk ja konstant k on jõukonstant. Vastavad parameetreid vaata Tabel 3.

Aatomi tüübid			k (kcal/mol)	Θ_0
C	O	C	219.1	112.0
C	C	O	152.9	110.0
H	C	O	98.0	109.45
H	C	C	93.0	109.45
H	C	H	83.1	109.45

Tabel 3: PEO aatomite vahelised nurgapotentsiaali parameetrid

Nurga potentsiaale me anioonis ei kirjelda, kuna tasakaaluline asend saavutatakse Coulombi ja van der Waalsi mõjude toimetel.

Polümeeri ahela dihedraali potentsiaal lahendati järgmise võrrandiga [11]

$$U(\Theta) = \sum_{n=1}^7 A_n (1 -)^n \sin^n(\Theta),$$

ning vastavaid parameetreid vaata Tabel 4.

	- O - C - (kcal/mol)	- C - C - (kcal/mol)
A_1 (kcal/mol)	0.5282043	1.2382951
A_2 (kcal/mol)	3.6292207	1.3403941
A_3 (kcal/mol)	4.2618890	1.4978789
A_4 (kcal/mol)	-7.7531743	-3.6847501
A_5 (kcal/mol)	-3.3127859	-0.1619569

A_6 (kcal/mol)	-0.2843781	-1.0906181
A_7 (kcal/mol)	2.9430208	0.8523389

Tabel 4: PEO dihedraali potentsiaali parameetrid

Van der Waalsi potentsiaaliks kasutame nii 6-12 tüüpi kui ka Buckinghami tüüpi potentsiaale.

6-12 potentsiaali kasutame NABH_4 -ga seotud kaugmõju kirjeldamiseks, mille võrrand on järgmine

$$U(r) = \left(\frac{A}{r^{12}} \right) - \left(\frac{B}{r^6} \right).$$

Saadud tulemused on Tabel 5. Parameetrid on leitud kasutades UFF jõuvälja.

Buckingham'i potentsiaali kirjeldatakse võrrandiga

$$U(r) = A \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) - \frac{C}{r^6}$$

ja kasutatakse seda polümeeri siseste interaktsioonide kirjeldamiseks. Vastavad parameetrid Tabel 6.

Aatomi tüüp	Aatomi tüüp	Potentsiaali tüüp	A (\AA^{12} kcal/mol)	B (\AA^6 kcal/mol)
Na	Na	12-6	14892.2	42.3
Na	B	12-6	277920.5	285.8
Na	H _B	12-6	14814.8	46.4
Na	C	12-6	142198.5	178.7
Na	O	12-6	57093.7	98.4
Na	H	12-6	14814.8	46.4
B	B	12-6	3863892.8	1667.9

B	H _B	12-6	285133.5	318.6
B	C	12-6	2088225.1	1071.6
B	O	12-6	917158.9	617.5
B	H	12-6	285133.5	318.6
H _B	H _B	12-6	14689.5	50.8
H _B	C	12-6	145064.0	198.6
H _B	O	12-6	57701.7	108.9
H _B	H	12-6	14689.5	50.8

Tabel 5: NaBH₄-ga seotud kaugmõju parameetrid

Aatomi tüüp	Aatomi tüüp	Potentsiaali tüüp	A (kcal/mol)	ρ (Å)	C (kcal/mol Å ⁻⁶)
O	O	Buckingham	58298.9	0.24849	192.1
O	C	Buckingham	42931.6	0.27550	352.8
O	H	Buckingham	20432.6	0.24450	98.8
C	C	Buckingham	31615.1	0.30251	647.8
C	H	Buckingham	15046.7	0.27151	181.5
H	H	Buckingham	7161.2	0.24050	50.8

Tabel 6: PEO sisesed kaugmõju parameetrid

Mudel

Vastav amorfne polümeer genereeriti kasutades juhuslikku Monte-Carlo kasvamist. Saadud süsteemi lisati 10 Na katiooni ja 10 BH₄ aniooni. Me kasutame molekulaardünaamika arvutustes 0,1 fs ajasammu. Selline ajasamm on tingitud sidemetest anioonis.

Töös kasutatakse 200 ühikust koosnevat EO polümeeri ja 10 NaBH₄ molekulist koosnevat ühikrakku. Nende omavaheline suhe on seega 20. Oma arvutustes kasutame lokaalselt modifitseeritud tarkvara DL_POLY [12].

Simulatsiooni ühikraku külgede pikkused on 28Å, 22.4Å ja 23.6Å. Kasutatakse perioodilisi ääritingimusi. Elektrostaatilise kaugmõju arvutamisel kasutame Ewaldi summa meetodit [5]. Ewaldi summa on parim elektrostaatilise interaktsiooni arvutamise meetod nii perioodilistes kui ka pseudoperioodilistes süsteemides. Neutraalse, perioodilise süsteemi põhimudel kujutab endast laetud ionide kogumit, mis omavahel on interaktsioonides Coulombi potentsiaalide kaudu. Ewaldi meetod teeb sellesse mudelisse kaks täiendust. Esiteks neutraliseeritakse iga ioon vastasmärgilise sfäärilise gaussiani pilve superpositsiooniga. Ewaldi summas kasutataksegi saadud kogumit ionidest ja gaussiani laengutest nende ümber, kui ühte ruumi osakest. Antud lähimõjuga osakesi rakendatakse nüüd DL_POLY jõuvälja meetodites. Teiseks muudatuseks on teise kihi sfääriliste gaussiani laengute lisamine ning seekord samade laengutega, mis on originaalioonidel ning tulemuseks on esimese gaussiani laengukihi neutraliseerimine. Nende gaussianite tõttu saadakse potentsiaal Poisson valemist ning lahendatakse Fourier seeriatena pöördruumis. Ewaldi meetodi abiga vahetatakse reaalse ruumi lõpmatu summa kahe lõpliku summaga, millest üks on reaalses ruumis ning teine pöördruumis.

Simulatsiooni alustasime konstantse ruumala ja temperatuuriga, kasutades Nosé-Hooveri [13] (NVT) termostaati 300ps jooksul, millele järgnes 500ps pikkune simulatsioon konstantse rõhu ja temperatuuri (NPT) tingimustes.

Kasutatud raud- ja tarkvara

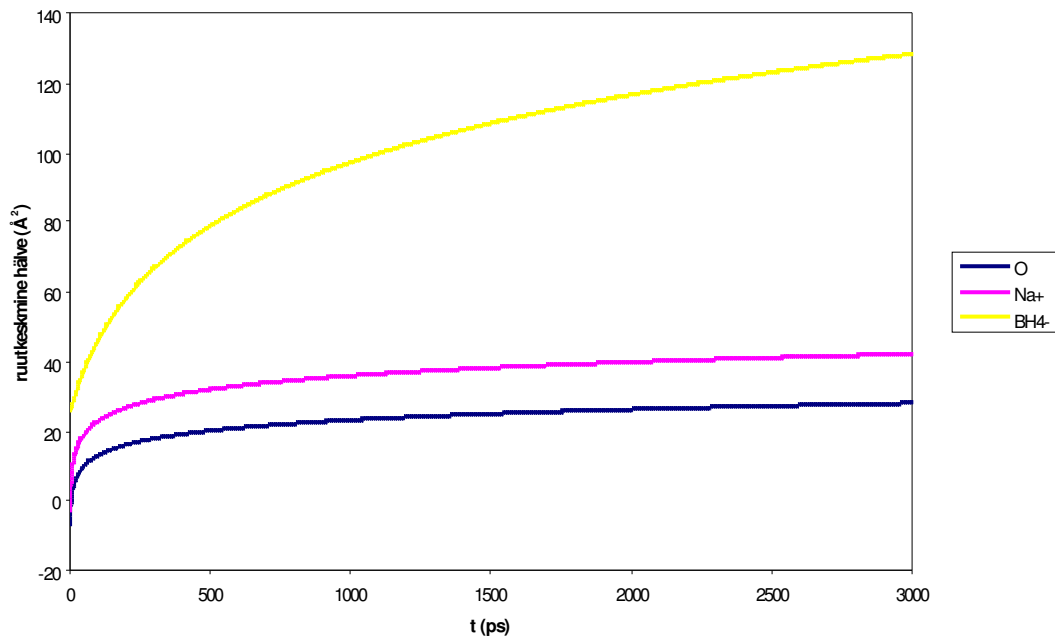
Arvutusteks kasutati kahte, Uppsalas ja Linköpingus asuvat Pentium protsessoritega PC klastrit. Arvutid ühendati üksteisega Scali kaardimoodulite kaudu [14]. Paralleeliseerimiseks kasutati jagatud mälu mudelit. Paralleeliseerimise tarkvara pakett baseerub *Message Passing Interface*'l [15] [16] (MPI) standardil. Kokku kulus arvutusteks aega umbes 1000 protsessori tundi.

Arvutustulemuste visuaalseks uurimiseks, graafiliste piltide kujundamiseks kasutati tarkvarapaketti MOLMOL [17].

Tulemuste analüüs

MD arvutuste tulemustest me arvasime erinevate aatomite ruutkeskmise hälbe (MSD), mis iseloomustab aatomite difusiooni. Meie puhul kasutatavad simulatsiooni ajad pole piisavad, aga põhimõtteliselt MSD graafiku tõusust saab arvutada difusiooni koefitsiendi. Me arvasime ka difusiooni koefitsiendi, kuid saadud väärtused on liiga kõrged. Analoogiliste süsteemide arvutused näitavad, et vajalik simulatsiooni aeg ületab 50ns, mis aga antud aja piires polnud tehniliselt võimalik saavutada.

MSD graafikult Joonis 1 näeme, et Na ja BH_4 MSD on väga sarnased ning BH_4 iooni liikuvus on oluliselt suurem. Me saame siit oletada, et Na ioon on oluliselt koordineeritud polümeeri ahela poolt.



Joonis 2: Ruutkeskmise hälve

Meie poolt arvatud difusiooni koefitsiendid on

$$D_O = 0.08 \cdot 10^{-9} \frac{m^2}{s}$$
$$D_{Na} = 0.1 \cdot 10^{-9} \frac{m^2}{s}$$
$$D_{BH_4} = 0.65 \cdot 10^{-9} \frac{m^2}{s}$$

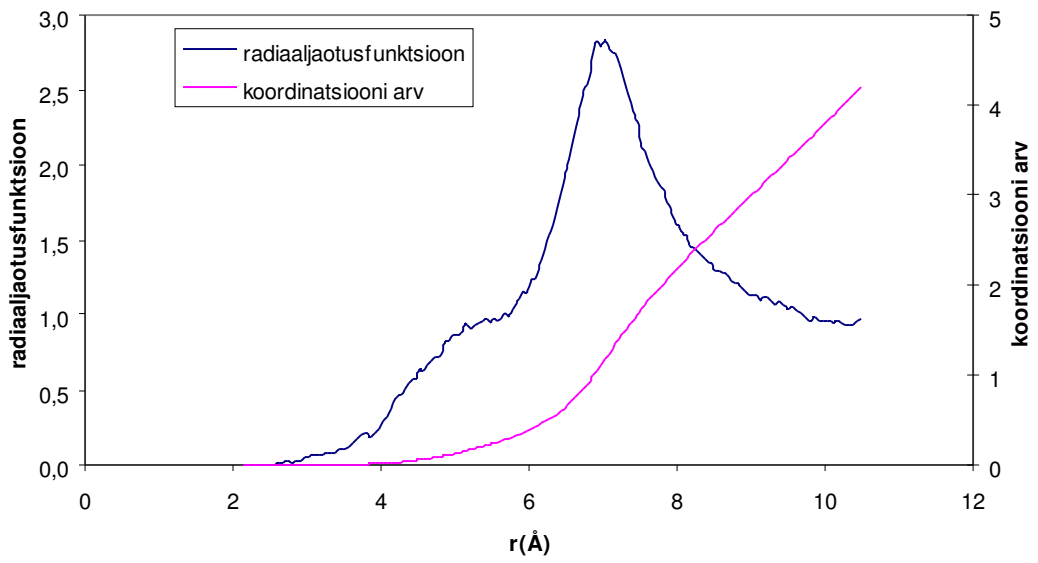
Saadud väärtused on oluliselt kõrgemad reaalistest andmetest, mis on tingitud lühikesest ajasammust.

Joonised 1-5 sisaldavad erinevate aatomite vahelisi radiaaljaotusfunktsioone. Radiaaljaotusfunktsioon iseloomustab mingit tüüpi aatomite omavahelist keskmist kaugust. Saadud tulemused ehk RDF esimesed maksimumid on heas kooskõlas eksperimentaalsete andmetega [18], mis omakorda sisendavad kindlust, et meie poolt kasutatav jõuväli võiks olla kasutatav ka edasistes uuringutes.

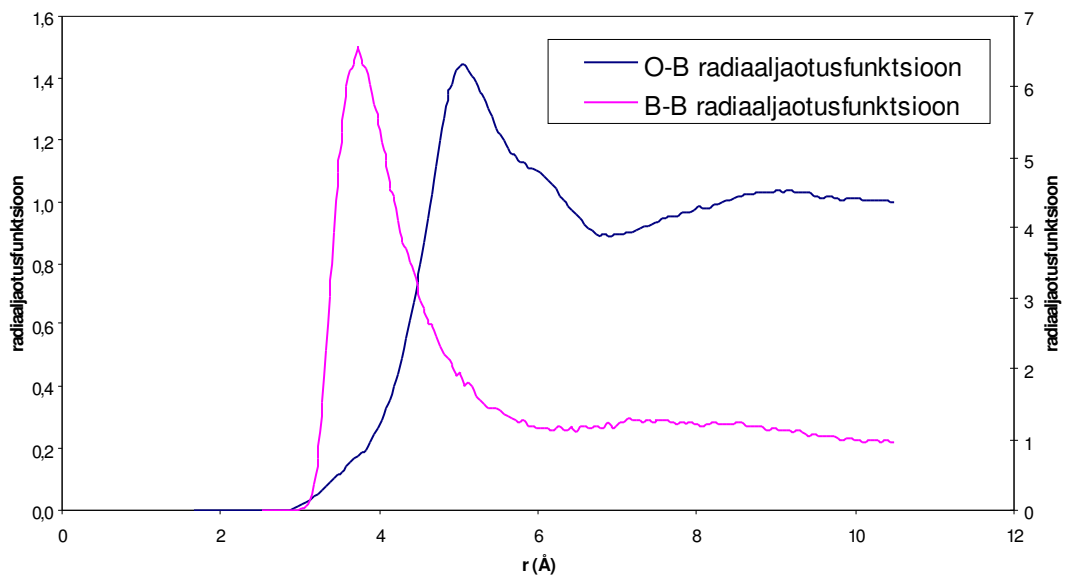
Me näeme, et Na ioon on koordineeritud umbes 6oksiidi hapniku poolt, mis seletab, miks Naiooni ja oksidi MSD on sarnaste omadustega. Selleks, et Na saaks liikuda edasi mööda polümeeri ahelat, on vaja märgatava energiaga fluktuatsiooni, sest on vaja vähemalt 7 EO ühiku pikkust polümeeri ahelat ümber struktureerida.

NaBH₄ ei moodusta ioonpaare, samas võib aga leida tendentsi, et BH₄ioonid kalduvad moodustama klastreid. Meie piiratud simulatsiooni aja jooksul on moodustunud üks kolmest BH₄ioonist koosnev klaster.

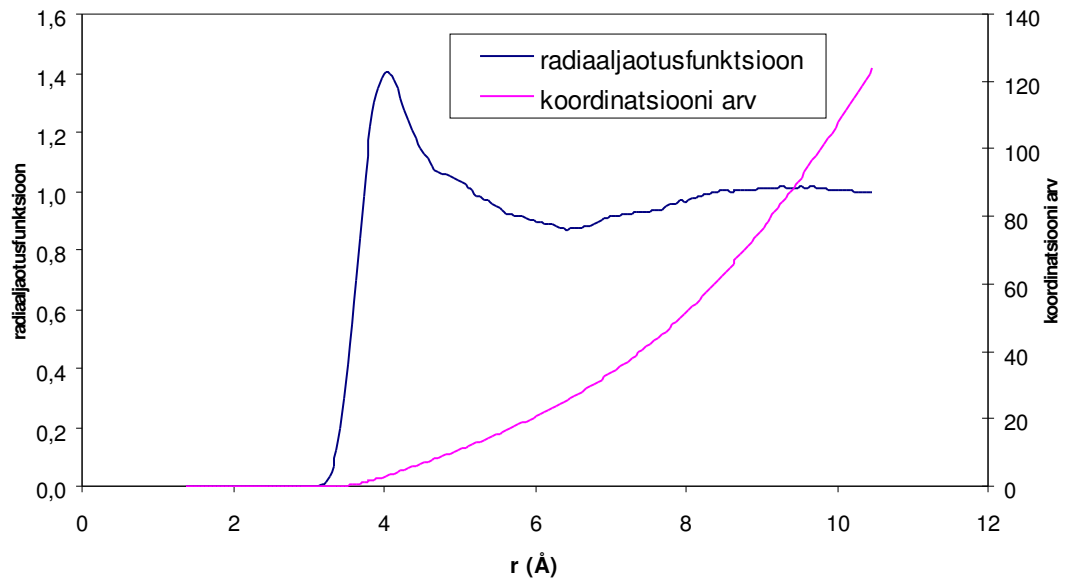
Üht tüüpilist Na ja PEO koordinatsiooni struktuur on kujutatud Joonis 7.



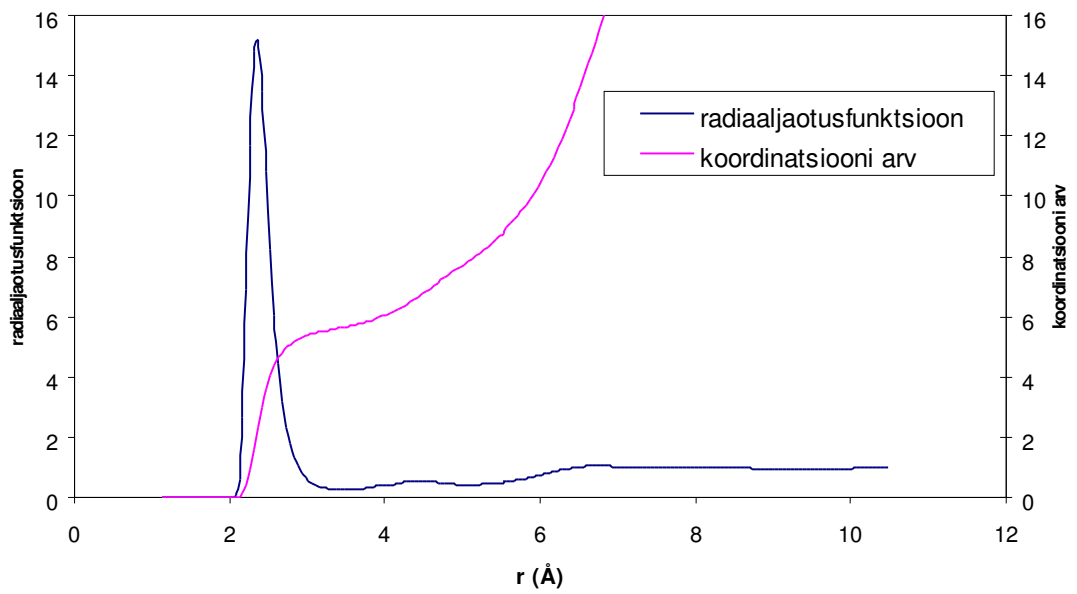
Joonis 3: Radiaaljaotusfunktsioonid Na ja B vahel



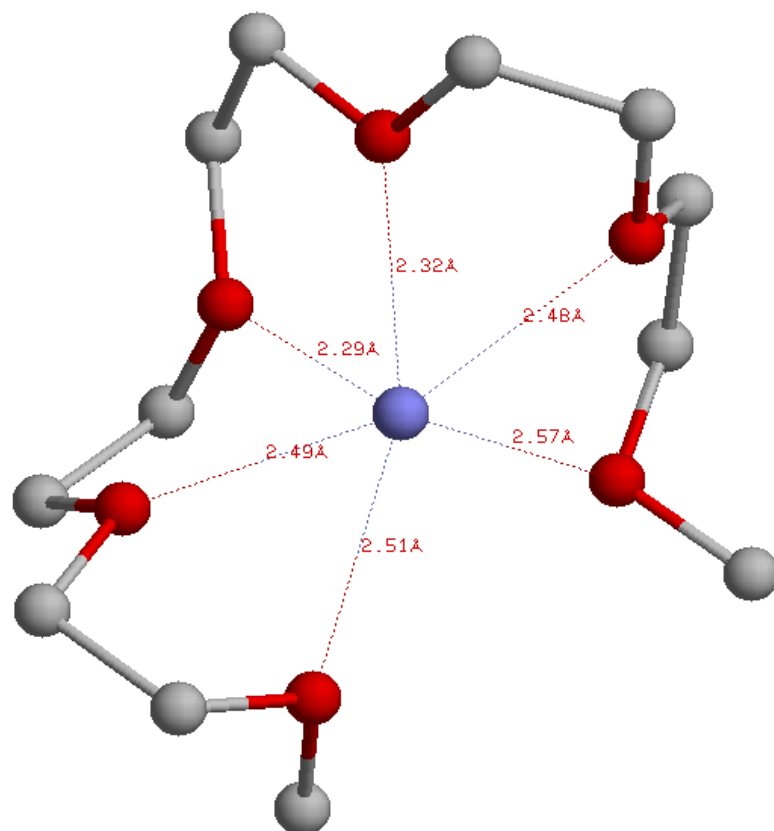
Joonis 4: Radiaaljaotusfunktsioonid O ja B ning B ja B vahel



Joonis 5: Radiaaljaotusfunktsioonid C ja B vahel



Joonis 6: Radiaaljaotusfunktsioonid O ja Na vahel



Joonis 7: Na ja PEO koordinatsiooni struktuur

Järeldused

Kasutades jõuvälja, mis on kombineeritud eelnevalt testitud PEO jõuväljast, UFF väljast ja kvantkeemiliste arvutuste tulemustest, me simuleerisime $\text{NaBH}_4(\text{EO})_{20}$ kompleksi.

Meie eesmärgiks oli leida ja testida NaBH_4 jõuväli, mis sobiks edasiseks kasutuseks Nafioni® laadsetes polümeerides.

Simulatsiooni tulemused langevad piisava täpsusega kokku eksperimentaalsete andmetega [18]. Me nägime, et Na ioon on koordineeritud umbes 6 hapniku poolt. Na ei moodusta ioonpaare aniooniga, samas anioon ise hakkab moodustama klastreid, mis omakorda vähendab anioonset juhtivust.

Kokkuvõte

Antud töö eesmärgiks oli leida sobilik jõuväli NaBH_4 soolale polümeerses elektrolüüdis. Kaugemas perspektiivis on soov simuleerida ioonsetes elektroaktiivsetes polümeerides toimuvaid protsesse. Kuna aga hetkel puudusid nii NaBH_4 kui ka EAP-de kohta sobivad jõuvälja parameetrid, kuid samas oli teada hästiuuritud polüetüleenoksiidi jõuväli, siis selles töös simuleeritaksegi $\text{NaBH}_4(\text{EO})_{20}$ struktuuri, kasutades selleks molekulaardünaamilisi ja kvantkeemilisi arvutusi. Leitakse parameetrid universaalsele jõuväljale UFF ning molekulaardünaamilised arvutused sooritatakse DL_POLY nimelise molekulaardünaamilise simulatsiooni paketiga. Arvutuseksperimendist nägime, et antud süsteemis Na ioon ei moodusta BH_4 aniooniga paare, vaid koordineerub umbes 6 polüetüleenoksiidi polümeeri O aatomiga. Tulemuste põhjal võib võita, et on leitud sobilik jõuväli NaBH_4 -le ning edaspidi on võimalik sama jõuvälja kasutada ioonsete elektroaktiivsete polümeeride juures.

Kasutatud kirjandus

- [1] Bar-Cohen, Y., 2001, *Electroactive Polymer (EAP) Actuators as Artificial Muscles*, SPIE Press, Washington USA.
- [2] Gellings, P., J., Bouwmeester, H., J., M., 1997, *Solid State Electrochemistry*, CRC Press.
- [3] Jensen, F., 2002, *Introduction to Computational Chemistry*, JohnWiley & Sons, Inc.
- [4] Raabe, D., 1998, *Computational Materials Science: The Simulations of Materials, Microstructures and Properties*, Wiley-VCH.
- [5] Allen, M. P., Tildesley, D. J., *Computer Simulation of Liquids*, Oxford University Press: New York, 1987.
- [6] E.I. du Pont de Nemours and Company. All rights reserved.
- [7] Larminie, J., Dicks, A., 2001, *Fuel Cell Systems Explained*, John Wiley & Sons, Inc.
- [8] *Gaussian 98 (Revision A.11)*, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, Jr., R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, P. Salvador, J. J. Dannenberg, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, A. G. Baboul, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, C. Gonzalez, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J. A. Pople, *Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2001*.
- [9] Ryckaert, J. P., Ciccotti, G., and Berendsen, H. J. C., 1977, *J. Comput. Phys.*, 23, 327.
- [10] A. K. Rappé, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III and W. M. Skiff, *J. Am. Chem. Soc.*, 114 (1992), 10024.
- [11] S. Neyertz, D. Brown and J. O. Thomas, *J. Chem. Phys.*, 1994, 101, 10064.
- [12] The DL_POLY Project, W. Smith and T. Forester, TCS Division, Daresbury Laboratory, Daresbury, Warrington WA4 4AD, England.
- [13] Hoover, W. G., 1985, *Phys. Rev.*, A31, 1695.
- [14] <http://www.dolphins.com/>
- [15] Gropp, W., Lusk, E., Skjellum, A., 1999, *Using MPI*, 2nd Edition, MIT Press.

- [16] Snir, M., Otto, S., Huss-Lederman, S., Walker, D., Dongarra, J.,
MPI: The Complete Reference, MIT Press.
- [17] Koradi, R., Billeter, M., and Wüthrich, K. (1996) *J Mol Graphics* 14, 51-55.
- [18] Neiertz, S.; Brown, D.; *J. Chem. Phys.*, 1996, 104, 3797.

Resume

In this work the goal is to find an appropriate force field of NaBH_4 in a polymeric electrolyte. We wish to simulate processes in an electroactive polymer in the future. While we hadn't right force field's parameters for NaBH_4 either EAP at the present, but we had well-known force field for PEO and therefore here is simulated structure of NaBH_4 . Molecular dynamics and quantum chemistry are used for that purpose. Valid properties are found for forcefield and calculation of molecular dynamics are calculated with DL_POLY which is a parallel molecular dynamics simulation package. We saw from the calculations of results in this system Na cation doesn't cooperate with BH_4 anion any more and even coordinate about with O atom of six PEO. According to results we can conclude that we found force field to work on for NaBH_4 and therefore results can be used in an ionic electroactive polymer.