

НОВЫЙ МЕТОД КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИЙ И ТОПОЛОГИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОСТРУКТУР В ЖИДКИХ И АДСОРБИРОВАННЫХ СПИРТАХ, ДИОЛАХ И ИХ РАСТВОРАХ

Толмачев А.М. , Хондарь О.Г., Кучеров А.В., Анучин К.М., Фирсов Д.А.

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, кафедра физической химии

Впервые разработанный авторами метод (МДТГ [1]) использован для анализа зависимостей концентраций и топологии молекулярных наноструктур от температуры и ширины пор в жидких и адсорбированных спиртах, диолах и их растворах. Алгоритм метода заключается в следующем:

- При соответствующих температурах с использованием универсальных силовых полей OPLSAA или MM3 поводится расчет молекулярно-динамических траекторий либо в программно задаваемом кубе с периодическими граничными условиями, заполненном жидким флюидом, либо в микропоре активного угля различной ширины, в которую помещаются разные количества молекул адсорбата;
- Рассчитываются радиальные функции распределения, по которым выбираются максимальные расстояния для Н-Н и О-Н-О, характеризующие водородную связь. Эти характеристики зависят от выбранного для расчетов силового поля;
- На основании теории графов создаются «математические образы» всех возможных молекулярных наноструктур в виде «матриц инцидентности» или «матриц смежности» [1], что позволяет перейти к компьютерному моделированию;
- Компьютерная программа позволяет на первом этапе запомнить все молекулярные наноструктуры, наблюдаемые на каждом мгновенном снимке молекулярно-динамической траектории, усреднить полученные данные по большому числу мгновенных снимков и представить «средние» концентрации ассоциатов, содержащих разные количества молекул спирта;
- На следующем этапе рассчитываются концентрации и характеристики конкретных топологических структур (цепочек, разветвленных цепочек, циклов, циклов с ответвлениями в виде разных цепочек и т. п.) для каждой группы молекулярных наноструктур с данным числом молекул спирта в ассоциатах.

1. А.М.Толмачев, Г.О. Хондарь, К.М. Анучин, А.В. Кучеров // Коллоидный журнал. 2009. Т. 71. № 6. С. 844-851.

