

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ЖИДКИХ И АДсорБИРОВАННЫХ ВЕЩЕСТВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЭЛЕМЕНТОВ ТЕОРИИ ГРАФОВ

К. М. Анучин

¹ *Лаборатория равновесной адсорбции ИФХЭ РАН,
119071, Москва, Ленинский проспект, д.31, корп. 4;
e-mail: kossstik@yandex.ru*

Метод молекулярной механики является мощным инструментом для качественного и количественного изучения структуры различных веществ. Благодаря использованию универсального потенциала взаимодействия, возможно, учитывать не только взаимодействия между молекулами, но и их конформации.

На примере графена, а также адсорбированного в модельной микропоре активного угля бензола, показана возможность качественного анализа структуры. Оказалось, что графен имеет «волнистую» структуру, а бензол имеет планарную ориентацию относительно стенки микропоры.

Показана возможность анализа наноструктур образованных водородными связями с использованием элементов теории графов и анализа молекулярно – динамических траекторий, на примере адсорбированной в микропоре воды. При невысоком заполнении образуется два, слоя с различным набором ассоциатов, при дальнейшем заполнении слои слипаются в один большой ассоциат.

Проведён анализ структуры жидкого этанола, получено распределение молекул по ассоциатам различного размера. Показан изомерный состав ассоциатов образованный шестью молекулами этанола.

На примере раствора смеси этилового спирта и воды показана возможность анализа двухкомпонентных смесей образующих водородные связи. Установлено, что этанол в растворе присутствует в основном в виде мономеров и димеров.