

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО АНАЛИЗА МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОСТРУКТУР ФЛЮИДОВ В МИКРОПОРИСТЫХ АКТИВНЫХ УГЛЯХ И ОБЪЕМНЫХ РАСТВОРАХ

Г.О. Хондарь*, К.М. Анучин*, А.В. Кучеров, Т.В. Богдан, А.М. Толмачев

МГУ им. М.В.Ломоносова, E-mail: amtolmach@yandex.ru

** ИФХЭ РАН*

На основании молекулярно-динамических расчетов с универсальными атом-атомными потенциалами и приложений дискретной математики, а именно теории графов, впервые разработан метод и соответствующая компьютерная программа, позволяющая распознавать и запоминать все молекулярные наноструктуры, наблюдаемые на каждом мгновенном снимке молекулярно-динамической траектории, усреднять данные для любого количества таких снимков, представляя таким образом «усредненные» концентрации ассоциатов (димеров, тримеров и т. д.) и затем определять концентрации и структурные характеристики (длины связей, углы и т. д.) соответствующих структур (например, цепочек, разветвленных цепочек, циклов и т. д.) в каждой группе ассоциатов. Программа использована для топологического анализа адсорбированных в щелевидных микропорах активных углей и жидких этанола, бензола, хлорбензола, о-хлортолуола. В докладе рассмотрены:

- Способы определения и задания параметров межмолекулярных связей для каждого вещества;
- Зависимости топологии молекулярных наноструктур от ширины микропор и количества молекул адсорбатов в поре;
- Сравнительные характеристики (концентрации, наборы ассоциатов) молекулярных наноструктур адсорбированных и жидких флюидов;
- Структурные характеристики каждой группы ассоциатов.

Разработанный метод позволяет проводить количественный топологический анализ молекулярных наноструктур для различных веществ и растворов в адсорбированном или жидком состоянии, что открывает перспективы для установления фундаментальной связи ассоцирование – макросвойства.