

ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ НАДМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР АДсорбированного и Жидкого ЭТАНОЛА

Г.О. Хондарь, А.А. Фомкин

*ИФХЭ РАН, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4
e-mail: george-eclipse@yandex.ru*

В развитие работ по анализу надмолекулярных структур адсорбатов на основе мгновенных снимков при молекулярно-динамических расчетах нами был разработан новый метод получения количественных характеристик таких структур, основанный на графах. Специальная компьютерная программа, впервые разработанная нами, позволяет вычленять и запоминать все структуры (например, в случае спиртов надмолекулярные структуры, образованные водородными связями, длиной 1,5-3,0Å), наблюдаемые на каждом мгновенном снимке, усреднять данные для любого количества таких снимков, представляя таким образом «усредненную» топологию надмолекулярных структур ($C_2\%$, $C_3\%$ и т. д.) и затем определять структурные характеристики (длины связей, углы и т. п.) каждой из структур в каждой группе.

Программа может работать с любыми программами, используемыми в молекулярно-динамических расчетах, и проводить топологический анализ надмолекулярных структур для различных веществ в адсорбированном или жидком состоянии. В дальнейшем этот метод может быть распространен на анализ надмолекулярных структур в адсорбированных и жидких растворах.