

## ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОСТРУКТУР СПИРТОВ, ДИОЛОВ И ВОДЫ В МИКРОПОРИСТЫХ АКТИВНЫХ УГЛЯХ И ОБЪЕМНЫХ РАСТВОРАХ

Г.О. Хондарь\*, К.М. Анучин\*, А.В. Кучеров, А.С. Спиридонов,  
А.М. Толмачев

*МГУ им. М.В. Ломоносова, ИФХЭ РАН\**  
*E-mail: amtolmach@yandex.ru*

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 спиртов, диолов и воды. 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.