

**Исследование ассоциатов в растворе ТВА методом МД**

Кадцын Е. Д.

Институт химической кинетики и горения СО РАН  
Новосибирский государственный университет

Водные растворы трет-бутанола (ТВА) интересны тем, что многие термодинамические и спектроскопические характеристики этих растворов имеют экстремумы в зависимости от концентрации, в частности при 2-5% (мольных) ТВА. Считается, что уже при этих малых концентрациях начинается процесс ассоциации за счет гидрофобных взаимодействий между молекулами ТВА, и на молекулярном уровне раствор становится негомогенным, при увеличении концентрации возникает «микрорасслаивание» - возникновение областей с разным составом. Однако на сегодняшний день нет количественной картины данных процессов.

С помощью пакета молекулярно-динамического моделирования Gromacs, нами были получены полноатомные модели водных растворов ТВА при разных концентрациях (0.5-10%). Для сравнения были также получены водные растворы триметиламинооксида (ТМАО), молекула которого похожа на молекулу ТВА, и модель случайно расположенных шаров.

Проведен расчет функций радиального распределения (ФРР) между центрами растворенных молекул. Наличие для ТВА высокого первого пика, уже при самых малых концентрациях, указывает на тенденцию к ассоциации между молекулами ТВА. При концентрациях выше 3% происходит изменение второго и третьего пиков фрр, что говорит о том, что возникают более крупные ассоциаты из молекул ТВА.

Используя методы кластерного анализа, проведен количественный анализ кластеров из молекул ТВА в растворах при разной концентрации. Рассчитано распределение кластеров по размерам, найден средний размер кластера, изучена компактность кластеров, времена жизни кластеров и времена жизни молекул в кластерах. Было показано большое разнообразие возникающих кластеров. Сравнение с растворами ТМАО и системой случайных шаров показывает, что количество и размер кластеров в растворе ТВА существенно больше, чем в остальных системах. Используя проведенный анализ, были оценены константы ассоциации для трет-бутанола в воде, проведена оценка энтальпийного и энтропийного вкладов в свободную энергию ассоциации.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Медведев Н. Н.