

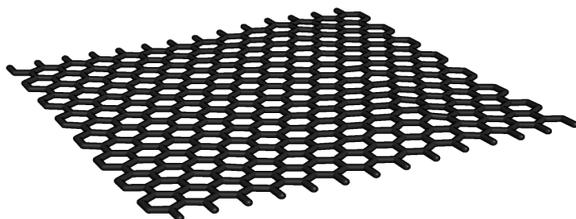
МОДЕЛИРОВАНИЕ СМАЧИВАНИЯ ГРАФЕНА МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Омарова А.Г., Зленко Д.В.

Кафедра биофизики биологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.
Москва, Ленинские горы, 1/24. E-mail: spirit-raksha@rambler.ru

Графен — углеродный двумерный кристалл, гидрофобный по своим свойствам. Экспериментальные методы получения водных растворов С-кластерных структур предполагают использование вспомогательных химических веществ, что делает возможным их присутствие в образующихся гидратных оболочках и влияние на сам процесс их образования [1]. Молекулярное моделирование позволяет рассмотреть процесс взаимодействия С-структуры с водой в отсутствие сторонних веществ, исключая их влияние на гидратацию.

Процесс моделирования смачивания графена водой выполнен в среде GROMACS, с использованием силового поля OPLS-AA [2] и периодических граничных условий. В качестве С-кластерной модели (рис.) был использован лист графена размером 3.4x3.4 нм, содержащий 127 атомов углерода.



Жидкая среда представлена моделью воды TIP4P. Для системы объемом 115 нм³ был осуществлен расчет молекулярной динамики длиной 100 нс с шагом 10 пс. На основании полученных данных по формуле Эйнштейна (1) был рассчитан коэффициент самодиффузии воды над поверхностью графена.

$$D = \frac{1}{2N} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left(\frac{\Delta R^2}{\tau} \right), \quad (1)$$

Наблюдаемые изменения этой характеристики в зависимости от расстояния до графеновой пластины позволяют судить о степени ассоциации молекул воды с гидрофобной поверхностью и оценить характерную толщину координационного слоя жидкости.

Литература

1. В.А. Резников, В.Н. Целуйкин, А.М. Яфасов. Организация гидратной оболочки фуллерена C-60 // *Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы*, **12**, 2012, 2-5.
2. W.L. Jorgensen, D.S. Maxwell, J. Triado-Rives. Development and Testing of the OPLS All-Atom Force Field on Conformational Energetics and Properties of Organic Liquids // *J. Am. Chem. Soc.* **118**, 1996, 225-236.