

## СТАТИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ СПОНТАННОГО ДЕЛЕНИЯ В РАСТВОРАХ

Трегубова М.А., Зленко Д.В., Стовбун С.В.

Институт Химической Физики имени Н.Н.Семёнова РАН. Москва, Косыгина, 4

В остывающих растворах трифторацетилованных  $\alpha$ -амино-спиртов (ТФААС) спонтанно формируются сильно вытянутые структуры, получившие название струн. Струны представляют собой высокоструктурированные, жёсткие супрамолекулярные конструкции, образование которых происходит преимущественно за счёт межмолекулярных вандер-ваальсовых сил. Недавно нами было обнаружено, что образование струн происходит также в рацемических растворах ТФААС, при этом для части образцов дифрактограмма ксерогелей и гомохирального образца совпадают, поэтому есть основания полагать, что каждая струна в таких образцах энантимерно чистая. Таким образом, в системах ТФААС+растворитель, по-видимому, происходит спонтанное деление энантимеров.

Методом молекулярной динамики (МД) были смоделированы разбавленные рацемические растворы ТФААС, в которых молекулы ТФААС образуют жидкие капли, что наблюдалось также и в гомохиральных растворах. Анализ энантимерного состава капель в рацемических растворах показывает, что в мелких каплях (3–5 молекул) асимметрия состава в среднем не наблюдается. В то же время в каплях большего размера (7–10 молекул) наблюдается выраженный (1:3) избыток одного из энантимеров. В среднем образование капель, обогащенных левым или правым энантимером, оказывается равновероятным. Анализ энергии парных взаимодействия молекул ТФААС в каплях разного размера и состава показал, что в среднем энергия взаимодействия молекул в гомохиральных парах в крупных каплях, с выраженным энантимерным избытком, на 1–1.5 кДж/моль больше чем в парах с различной хиральностью молекул.

Полученные данные позволяют сформулировать следующий гипотетический механизм спонтанного деления в рассматриваемых растворах. Образование нанокapель в гомохиральном растворе подчиняется обычным статистическим закономерностям, в следствие чего возможно формирование капель с некоторым избытком одного из энантимеров. Ввиду того, что энергия взаимодействия двух одинаковых молекул оказывается чуть выше, присоединение к капле молекул находящегося в избытке энантимера оказывается несколько выгоднее. Это создает предпосылки для усиления асимметрии состава и образования более крупных, практически гомохиральных капель и частиц мезофазы. Как было показано раньше, такие частицы служат зародышами роста струн, следовательно, частица мезофазы составленная из правовращающих молекул даст начало правовращающей струне и наоборот.