

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЖИДКОГО ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ В ИНТЕРВАЛЕ ТЕМПЕРАТУР

Кирута Н.В., Родникова М.Н, Мазо М.А.¹, Балабаев Н.К.²

Учреждение Российской академии наук Институт общей и неорганической химии им.
Н.С. Курнакова РАН, Россия, 119991, г. Москва, Ленинский проспект д.31 Тел.:
(495)633-85-45 E-mail: rodnikova@igic.ras.ru

¹Учреждение Российской академии наук Институт химической физики им. Н.Н.
Семенова РАН, Россия, 119991, г. Москва, ул. Косыгина, 4 Тел.: (495) 939-7139 E-mail:
mazo@polymer.chph.ras.ru

²Учреждение Российской академии наук Институт математических проблем биологии
РАН, Россия, 142290, г. Пущино, ул. Институтская, 4 Тел.: (4967) 73-38-19 E-mail:
balabaev@impb.psn.ru

Цель работы. Методом молекулярной динамики определить изменение структуры жидкого этиленгликоля (ЭГ) в интервале температур $-10^{\circ} - +190^{\circ}\text{C}$. Недавние данные по кристаллическому ЭГ показали сложную картину пространственной сетки водородных связей в твёрдом ЭГ, в которой существуют слабые СН●●●О связи, играющие большую роль в структуре биологических систем. Ряд физико-химических свойств ЭГ и его растворов указывает на то, что пространственная сетка водородных связей сохраняется в жидком ЭГ, но изменяется с повышением температуры. Для моделирования водородной связи мы выбрали полноатомную модель ЭГ с потенциалами из силового поля amber-99, в котором в неявном виде учитывается водородная связь. Были получены температурные зависимости функций радиального распределения Н-Н, О-Н, О-О и С-Н в интервале $-10^{\circ} - +190^{\circ}\text{C}$. Имеющиеся литературные данные относятся в основном к одной температуре и не учитывают распределение электронной плотности в связях С-Н, то есть слабых водородных связей СН●●●О. Нами исследовался также конформационный состав молекул, который показал, что наиболее устойчивой конформацией молекулы ЭГ во всём температурном интервале является конформация tGg. С повышением температуры наибольшее изменение претерпевают функции радиального распределения С-Н, что говорит о разрыве наиболее слабых СН●●●О связей. К интерпретации полученных данных были привлечены квантово-химические расчёты равновесия димер ЭГ – открытая форма. Выводы. Слабые водородные связи СН●●●О, найденные в кристаллическом ЭГ, ослабевают и пропадают в жидком ЭГ с повышением температуры. Во всём изученном температурном интервале сохраняется пространственная сетка, образованная сильными ОН●●●О связями, которая претерпевает изменения с повышением температуры. Именно она определяет ряд физико-химических свойств ЭГ, в частности, большую вязкость этого вещества и её температурную зависимость; а также ряд явлений, таких как сольвофобные эффекты в этиленгликолевых растворах неэлектролитов.