

Российская академия наук
Институт проблем химической физики РАН
Московский государственный университет
Кабардино-Балкарский научный центр РАН

ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ
X Национальной кристаллохимической
конференции

Приэльбрусье, 5-9 июля 2021 г.

Конференция проводится при финансовой поддержке:



Института проблем химической физики РАН



ООО «Брукер», Bruker AXS



TechnoInfo Ltd



Conetech Ltd

Информационный партнер конференции:



Журнал структурной химии

Организационный комитет

- Алдошин Сергей Михайлович — председатель, ИПХФ РАН, академик
- Хромова Елена Сергеевна — ученый секретарь, ИПХФ РАН
- Антипов Евгений Викторович, МГУ, член-корреспондент РАН
- Асланов Леонид Александрович, МГУ, профессор
- Балагуров Анатолий Михайлович, ОИЯИ, профессор
- Блатов Владислав Анатольевич, Самарский университет, профессор
- Болдырева Елена Владимировна, НГУ, профессор
- Еременко Игорь Леонидович, ИОНХ РАН, академик
- Кривовичев Сергей Владимирович, СПбГУ, член-корреспондент РАН
- Кукушкин Вадим Юрьевич, СПбГУ, академик
- Лысенко Константин Александрович, МГУ, д.х.н., профессор РАН
- Минкин Владимир Исаакович, ЮНЦ, академик
- Сержкин Виктор Николаевич, Самарский университет, профессор
- Федин Владимир Петрович ИИХ СО РАН, член-корреспондент РАН
- Филатов Станислав Константинович, СПбГУ, профессор
- Цирельсон Владимир Григорьевич, РХТУ им. Д.И. Менделеева, профессор

**ОЦЕНКА ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ СИЛАНОЛЬНЫХ И
СИЛОКСАНОВЫХ СВЯЗЕЙ В ПРОЦЕССЕ
ОЛИГОМЕРИЗАЦИИ КРЕМНИЕВЫХ КИСЛОТ**

Изотова Е.Д.^{1@}, Рудакова М.А.¹, Крутьева М.А.², Акберова Н.И.¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань,
420008, Россия

²Юлихский исследовательский центр, г. Юлих, Германия

@ izotova.e.d@gmail.com

Теоретическое изучение процессов олигомеризации, формирования аморфных силикатов и структур с кристаллической решеткой требует использовать модели, адекватно описывающие изучаемые процессы. Особый интерес представляет применение реакционных силовых полей, позволяющих отслеживать структурные преобразования, что позволит отследить динамику и характер образования сложных молекулярных ансамблей.

В представляемой работе моделирование процессов олигомеризации кремниевых кислот проводилось с использованием реакционного силового поля FG [1]. Общий потенциал складывается из двухтельного потенциала Борна – Майера – Хаггинса (ВМН) и обобщенного трехтельного потенциала Стиллингера – Вебера (RSL2)[2]. Следует отметить, что параметры силового поля, изначально описывают структуру кварца, однако позднее авторы расширяют область применимости подхода и для описания поведения кремниевых кислот в водных растворах [3].

Изучаемая система на начальном этапе молекулярной динамики представлена равноудаленными молекулами ортокремниевой кислоты ($\text{Si}(\text{OH})_4$), которые в ходе проведения численного эксперимента взаимодействуют друг с другом, что приводит к формированию разнообразных структур с большим размером. Ранее продемонстрировано, что разнообразие низших олигомеров и их частотная характеристика, полученные с применением силового поля FG, сопоставима с экспериментом [2].

В связи с тем, что протоколы экспериментов моделирования конденсации кремниевых кислот, подразумевают использование высоких температур 1500–3000K [1, 3, 4] остается открытым вопрос о стабильности образующихся структур и их "времени жизни". В связи с этим в работе уделено особое внимание двум вопросам:

- оценка “времени жизни” ковалентной связи Si-O, которая может образоваться в процессе роста олигомерной цепи (силоксановая связь), а также связь, которая образуется при непосредственном взаимодействии с растворителем (силанольная связь).

- оценка “времени жизни” связей в образовавшемся олигомере. Для этого был выбран сформированный олигомер на последнем шаге молекулярной динамики, содержащий 13 атомов кремния и отслежены траектории существования связей в выбранной молекуле.

Для анализа “времен жизни” связей определялось количество соответствующего типа связей в составе выбранных олигомеров, зарегистрированных на последнем этапе молекулярной динамики или на 3 нс эксперимента. Затем, наличие, установленных вышеуказанном образом связей, регистрировалось на каждом шаге молекулярной динамики с учетом полученной “траектории” образования каждого олигомера в течение последних 250 пс эксперимента.

В результате установлено, что все силоксановые связи, обнаруженные в составе олигомеров на конечном этапе моделирования, сформировались и оставались неизменными 90 пс из исследованных 250 пс. В то время как процесс формирования силанольных связей продолжался в течении всего времени эксперимента для 20% системы, неизменными же в течение последних 90 пс оставалось около 40% силанольных связей.

[1] Feuston В.Р., 1990, J. Phys. Chem. 94. 5351–56. doi: 10.1021/j100376a035

[2] Изотова Е.Д., 2020, Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 162. 5–26. doi: 10.26907/2541-7746.2020.1.5-26

[3] Rao N.Z., 2004, J. Phys. Chem. B. 108. 12418–28. doi: 10.1021/jp049169f

[4] Rimsza J.M., 2018, Mater. Degrad. 2. doi: 10.1038/s41529-018-0039-0