

## ФОРМИРОВАНИЕ ЗАРОДЫША АНИЗОМЕТРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ

Зленко Д.В.,<sup>1,2</sup> Стовбун С.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт Химической Физики имени Н.Н. Семенова РАН. Москва, Косыгина, 4.

<sup>2</sup> Каф. Биофизики Биологического ф-та МГУ имени М.В. Ломоносова.  
Москва, Ленинские горы, 1/24. dvzlenko@gmail.com

Решётка гелей, образующихся в разбавленных растворах низкомолекулярных веществ, формируется изолированными анизометричными элементами, так как формирование классического перколяционного кластера невозможно из-за низкой концентрации гелатора. Примером этого явления является образование супрамолекулярных струн в растворах N-трифторацетилованных аминокспиртов (ТФААС [1]). Также известно, что в растворах гелеобразующих ТФААС с концентрациями ниже порога гелеобразования, наблюдается дисперсная фаза, отсутствующая в растворах ТФААС, не образующих гели. Это позволяет рассматривать частицы дисперсной фазы в качестве зародышей, на которых начинается рост струн, и определяет интерес к их структуре.

Процесс агрегации молекул ТФААС в неполярном растворителе был смоделирован методом молекулярной динамики. Показано, что время диффузии молекул в агрегатах существенно меньше времени их вращательной корреляции, что позволяет отождествить эти агрегаты с жидкими каплями. Каждая капля обладает ядром, на 60% состоящим из молекул ТФААС. Поверхностный слой каплей обладает дробной размерностью  $\sim 1.5$ , что топологически соответствует пучку расходящихся в стороны ветвящихся лучей. Такая топология наблюдается и для агрегатов струн [2]. Показано, что основной вклад в энергию взаимодействия молекул ТФААС в каплях вносят дисперсионные силы (14 кДж/моль), в то время как электростатическая энергия составляет 4.2 кДж/моль.

Рассмотрим зависимости энергии взаимодействия от взаимной ориентации молекул в паре. Для хиральных молекул ТФААС наблюдается зависимость дисперсионной (а значит и полной) энергии взаимодействия от угла между дипольными моментами, максимум энергии соответствует антиколлинейной ориентации диполей. Эффект не наблюдается для ахирального ТФААС. Полная энергия, имеет два минимума в зависимости от взаимной ориентации векторов, определяющих ориентацию хирального центра: в коллинейном и антиколлинейном случае. Таким образом, существует два энергетически выгодных варианта образования пар молекул. При коллинейной ориентации векторов нормали, молекулы слипаются в стопки, в которых хиральные центры ориентированы единообразно. Такие стопки могут расти за счет присоединения к ним новых молекул, что можно рассматривать как прообраз анизометрической агрегации. Напротив, при антиколлинейной ориентации векторов нормали, дальнейший анизометрический рост агрегата оказывается невозможным, что можно рассматривать как модель образования изометрического осадка [3].

### Литература

1. *Kostyanovsky R.G. et. al. // Mendeleev Commun. 15(4): 140 – 141. 2005.*
2. *Зленко Д.В., Стовбун С.В. // Хим. Физика. Том 34(7): 79 – 92. 2015.*
3. *Зленко Д.В., Стовбун С.В. // Хим. Физика. В печати.*