

***VIII МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
С ЭЛЕМЕНТАМИ НАУЧНОЙ ШКОЛЫ ДЛЯ МОЛОДЕЖИ***

***«ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ
И ВЫСОКОЧИСТЫЕ ВЕЩЕСТВА»***

***СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
КОНФЕРЕНЦИИ***



5- 9 октября 2020, г. Суздаль

УДК 539.21(063)
ББК 22.36я431+22.37я431+30.37я431
Ф94

Ф94 VIII Международная конференция с элементами научной школы для молодежи «**ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ И ВЫСОКОЧИСТЫЕ ВЕЩЕСТВА**». Суздаль. 5-9 октября 2020 г./ Сборник материалов. – М: ИМЕТ РАН, 2018, 374 с.

ISBN 978-5-6043996-5-1

В сборнике материалов опубликованы доклады VIII Международной конференции с элементами научной школы для молодежи «**ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ НАНОМАТЕРИАЛЫ И ВЫСОКОЧИСТЫЕ ВЕЩЕСТВА**», содержащие результаты фундаментальных исследований в области наук о материалах и оценку экономической эффективности использования инновационных разработок. Затронуты вопросы, связанные с разработкой и созданием наноматериалов функционального назначения, в том числе металлических, особо чистых, керамических, полимерных и композиционных. Сборник предназначен для научных работников, специалистов, аспирантов, работающих в области наук о материалах, а также может быть полезен студентам старших курсов высших учебных заведений.

Конференция поддержана:

- РФФИ грант 20-03-22019 научные мероприятия
- ФОНД ИНФРАСТРУКТУРНЫХ И ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ. Группа РОСНАНО

Материалы публикуются в авторской редакции.
Сборник материалов доступен на сайте <http://www.fnm.imetran.ru>

© ИМЕТ РАН 2020



ОРГАНИЗАТОРЫ И ПАРТНЕРЫ КОНФЕРЕНЦИИ

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ**

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ ИМ. А.А. БАЙКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

**ФОНД ИНФРАСТРУКТУРНЫХ И ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ
ГРУППА РОСНАНО**

АО «КОМПОЗИТ» (Г. КОРОЛЕВ)

**ОБНИНСКОЕ НАУЧНО-ПРОИЗВОДСТВЕННОЕ ПРЕДПРИЯТИЕ «ТЕХНОЛОГИЯ»
ИМ. А. Г. РОМАШИНА**

**ООО «ТЕХМА» (Г. МОСКВА)
официальный сервис-агент конференции**

При поддержке

СОВЕТА МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ ИМЕТ РАН

**СОВЕТА МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ И СПЕЦИАЛИСТОВ
АО «КОМПОЗИТ»**

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТНЫХ ОБОЛОЧЕК РАСТВОРЕННЫХ ГАЗОВ

Тытик Д.Л.

Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН,

119991 Москва, Ленинский проспект, 31

dtytik@yandex.ru

MODELING OF HYDRATE SHELLS AROUND DISSOLVED GAS MOLECULES

Построены структурные модели стабильных оболочек связанной воды морфологически подобные полостям-многогранникам в водных клатратных каркасах (додекаэдр (рис.1), многогранники Аллена). В основе оболочек связанной воды лежат структурные элементы производные от твист-ванны – спирали 30/11 («ребра») и К-модули («вершины») «многогранников-оболочек». Приведены геометрические характеристики оболочек, оценены объемы их внутренних полостей, энергия оболочек связанной воды.

Обсуждена возможность применения структурных моделей связанной воды при моделировании строения межфазной области, микрогетерогенных свойств водных систем при растворении в воде атмосферных газов [1].

На основе модели поверхностного слоя воды [2] рассмотрен возможный молекулярный механизм формирования «промежуточных фаз вращения» (intermediate rotator phases) [3] на межфазной границе микрокапля воды/масло, приводящий при определенных физико-химических условиях к морфогенезу сферы в икосаэдр.

Рассмотрена молекулярная модель поверхностного натяжения на основе строения оболочек связанной воды и предложена эмпирическая формула для его расчета, включающая параметры молекулы воды и водородной связи.

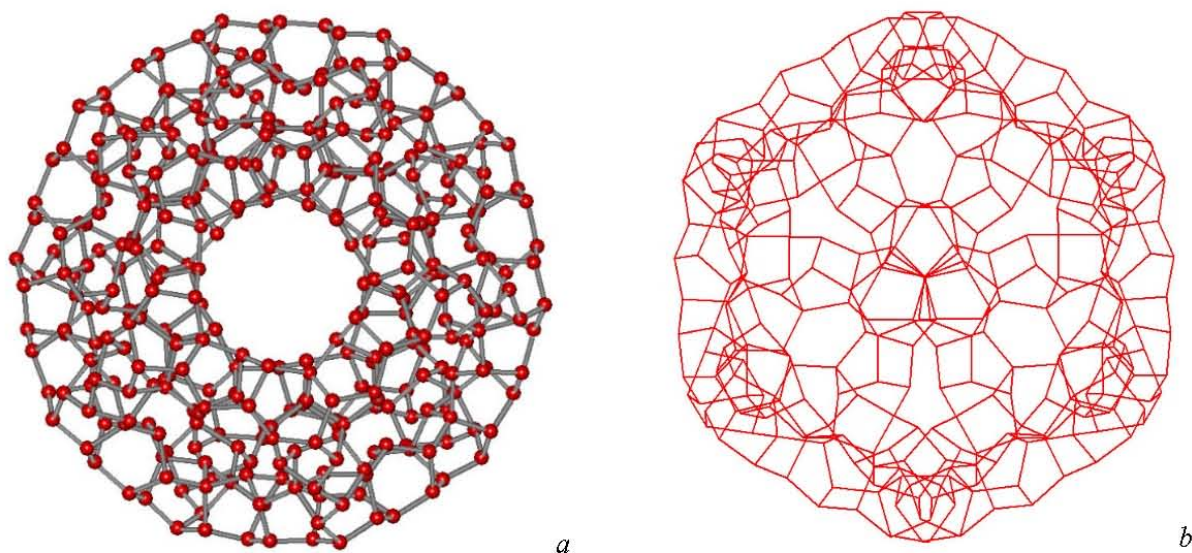


Рис.1. Проекция оболочки из молекул связанной воды морфологически подобной додекаэдру (5^{12}): вдоль оси, проходящей через середину противоположных граней додекаэдра, показаны атомы кислорода молекул воды и водородные связи (a); вдоль оси, проходящей через противоположные вершины додекаэдра (b). Показаны водородные связи

Работа частично выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 19-03-00696).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тытик Д.Л., Бусев С.А., Высоцкий В.В., Ревина А.А., Суворова О.В., Кузьмин В.И., Гадзаов А.Ф. // Ж. физ. химии, 2019. № 93. С. 1865–1869.
2. Бульенков Н.А., Желиговская Е.А. // Ж. физ. химии. 2006. № 80. С. 1784–1805.
3. Denkov N., Tcholakova S., Lesov I., Cholakova D., Smoukov S.K. // Nature. 2015, V. 528, P. 392–395.
