

# НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ СИЛОВОГО ПОЛЯ ClayFF ДЛЯ АТОМИСТИЧЕСКОГО КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРИРОДНЫХ И СИНТЕЗИРОВАННЫХ НАНОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ И ИХ ГИДРАТИРОВАННЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

*Калиничев А.Г.*

<sup>1</sup>*IL-SAMMA, Москва, Россия,* <sup>2</sup>*SUBATECH, Нант, Франция*  
*kalinich@subatech.in2p3.fr*

Детальное понимание на фундаментальном молекулярном уровне и способность предсказывать термодинамические, структурные и транспортные свойства "связанной" воды в глинах и других природных и синтетических нанопористых материалах чрезвычайно важны для многих геохимических и технологических приложений. Экспериментальные исследования таких систем на нанометровом масштабе не всегда возможны, а их результаты чаще всего не поддаются однозначной интерпретации и требуют построения каких-либо молекулярных моделей (часто — вполне умозрительных) для извлечения и количественной оценки вкладов поверхностей и нанопорового пространства в суммарные свойства материала на основе таких данных. Методы атомистического компьютерного моделирования служат здесь хорошим подспорьем и существенно дополняют данные измерений, даже если таковые имеются. Однако построению точных и реалистичных молекулярных моделей таких сложных материалов, как гидратированные глины, препятствует великое разнообразие их составов, и значительный вклад структурного и композиционного беспорядка. Силовое поле ClayFF [1] изначально было разработано для преодоления именно этих трудностей в компьютерном моделировании таких материалов и адсорбции различных неорганических и органических молекул на их поверхностях. В докладе будет дан краткий обзор основных возможностей, допущений и ограничений применения параметризации ClayFF для атомистического компьютерного моделирования упомянутых материалов с особым акцентом на новые результаты, позволяющие строить и количественно изучать более совершенные модели [2–4].

- 
1. R.T. Cygan, J.-J. Liang, A.G. Kalinichev (2004) *J. Phys. Chem. B*, 108, 1255-1266.
  2. M.Szczerba, A.G.Kalinichev (2016) *Clays Clay Min.*, 64, 488-502.
  3. Androniuk, C. Landesman, P. Henocq, A.G. Kalinichev (2017) *Physics and Chemistry of the Earth A/B/C*, 99, 194-203.
  4. M.Pouvreau, J.A.Greathouse, R.T.Cygan, A.G.Kalinichev (2017) *J. Phys.*

Chem. C., 121, 14757-14771.