

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МОЛЕКУЛ В ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЙ КОЛОНКЕ

**В.М. ЛУТКОВСКИЙ, Ю.Ю. ПИЛИПЕНКО**  
(Белорусский государственный университет, Минск)

Абсорбционная хроматография, основанная на пропускании исследуемой смеси через хроматографическую колонку, широко используется для анализа состава сложных смесей в специализированных лабораториях. Компоненты анализируемой смеси имеют различные коэффициенты диффузии, поэтому в колонке происходит разделение различных фракций по времени прохождения [1]. В качестве микроскопической колонки далее рассматривается капилляр, заполненный специально подобранным сорбентом. Актуальность рассматриваемой задачи обусловлена перспективой создания нового поколения носимых аналитических систем по технологии «лаборатория на кристалле» [2].

Рассматриваемая далее программная модель основана на методе молекулярной динамики, разработанном в 50-х годах прошлого века в Лос-Аламосской национальной лаборатории (США). В этом методе задействованы [3, 4]: численный алгоритм решения уравнений движения молекул (алгоритм Верле), основанный на законах Ньютона; периодические граничные условия, облегчающие выполнение законов сохранения массы и механической энергии; потенциал Ленарда-Джонса (или его модификации), определяющий характер парного взаимодействия молекул (сильное притяжение при уменьшении межмолекулярного расстояния и слабое притяжение при его увеличении). Данный метод позволяет моделировать термодинамические свойства газообразных и жидких сред даже при относительно небольшом количестве молекул, поэтому он успешно развивается и расширяет область применения, включая жидкие кристаллы и композиционные материалы. Разработаны различные версии программного кода на языках Fortran, Pascal и C++, причем в большинстве известных реализаций кода рассматриваются однородные молекулярные системы. Существуют специализированные программные средства для высокопроизводительных вычислительных систем, реализующие этот гибкий и мощный метод, такие как LAAMPS и GROMACS [5]. На факультете Радиофизики и компьютерных технологий Белорусского государственного университета метод молекулярной динамики изучается в специальном курсе «Моделирование биофизических систем», причем в лабораторном практикуме по общему курсу «Математическое моделирование» используется среда MATLAB/Simulink [6]. Поэтому при реализации рассматриваемой модели также использована среда MATLAB.

Следует отметить, что в отличие от [4] далее рассматривается неоднородная система молекул, поэтому при разработке кода предусмотрена возможность произвольного задания массы молекул. Это расширяет область применения рассматриваемого метода и позволяет моделировать движение легких молекул (светлые кружки на рисунке 1а) в промежутках между тяжелыми молекулами, выполняющими функции частиц сорбента (большие темные кружки). Для учета слабой и сильной адсорбции использован потенциал межмолекулярного взаимодействия, имеющий два локальных минимума, что также существенно расширяет возможности разработанной модели.

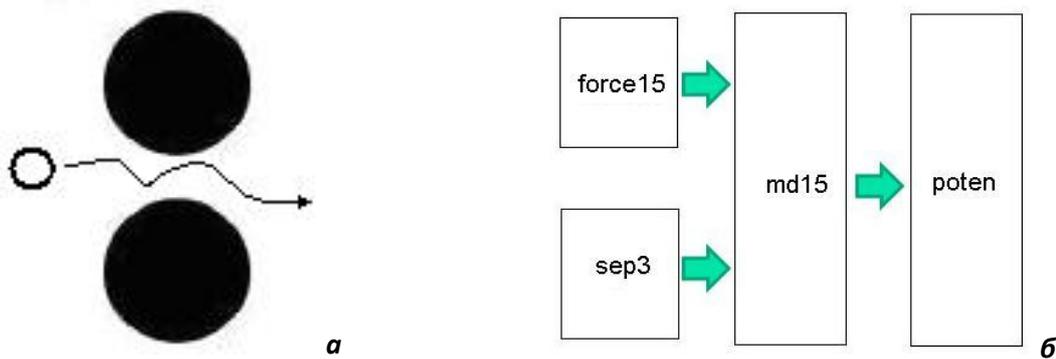


Рисунок 1. – Путь движения молекул (а) и структура программной модели (б)

Структура имитационной модели, представлена на рисунке 1б. В основной программе **md15** реализованы возможности задания начальной конфигурации молекул, интегрирования уравнений движения и сохранения текущей конфигурации. Функции **sep3** и **force15**, предназначены соответственно для вычисления межмолекулярных расстояний и силы их взаимодействия. Программа **poten** выполняет вспомогательную функцию визуализации графической зависимости силы взаимодействия от межмолекулярного расстояния. Рассмотренная программная модель при ее относительной простоте позволила учесть основные физические процессы в рассмотренной молекулярной системе. Оценки зависимости суммарного импульса и механической энергии подтверждают корректность разработанного кода и выбора заданного шага дискретного времени.

В качестве результата, представляющего практический интерес, получены распределения межмолекулярных расстояний при различных начальных условиях (координатах и скоростях молекул), характерные для эффекта адсорбции.

Авторы выражают благодарность доктору Д. Глушкову (Philipps University of Marburg, Германия) и А. Свидрицкому (БГУ) за предоставленную информацию.

#### Литература

1. Аналитическая хроматография / К.И. Сакодынский [и др.]. – М. : Химия, 1993. – 464 с.
2. Hlushkou, D. How Microscopic Characteristics of the Adsorption Kinetics Impact Macroscale Transport in Chromatographic Beds/ D. Hlushkou [et al.] // J. Phys Chem. C. – 2013. – Vol. 117 (44). – P. 22974–22985.
3. Гулд, Х. Компьютерное моделирование в физике / Х. Гулд, Я. Табочник ; пер. с англ. А.Н. Полюдова. – М. : Мир. – Т. 1. – 349 с.
4. Поршневу, С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете Matlab / С.В. Поршневу. – М., 2003. – 252 с.
5. LAMMPS vs GROMACS [Электронный ресурс] / David Huang. – Режим доступа: <http://lammps.sandia.gov/threads/msg05358.html>. – Дата доступа: 18.05.2018.
6. Апанасович, В.В. Matlab и Simulink для Windows : учеб. пособие / В.В Апанасович, В.В. Скакун. – М. : БГУ, 2002. – 72 с.