**Носков, Сергей Юрьевич.**

## Влияние коллективных эффектов на процессы селективной сольватации в системах вода-метанол-электролит : Компьютерное моделирование : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.04. - Иваново, 1999. - 123 с.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Носков, Сергей Юрьевич

I. Введение.

II. Экспериментальная часть.

1 .Методика компьютерных расчетов.

2.Используемые потенциалы взаимодействия.

3.Метод учета дальнодействующих сил.

4. Расчет теплоемкости из результатов компьютерного моделирования.

5. Расчет ПСС с учетом многочастичных корреляций.

6. Оценка корректности результатов.

III.

Глава. 1. Строение разбавленных растворов метанол-вода.

1.1. Теплоемкость смесей метанол -вода.

1.2. Функции радиального распределения.

1.3. Исследование сетки водородных связей методами статистической геометрии.

1.4. Ассоциация молекул метанола.

1.5. Динамические особенности строения разбавленных водных растворов метанола.

Глава 2. Структурные и динамические особенности строения водных растворов электролитов

2.1. Методы исследования структуры водных растворов электролитов.

2.2 Строение водных растворов ИаС1.

2.2.1 Функции радиального распределения.

2.2.2 Потенциал средней силы.

2.2.3. Статистика сетки водродных связей.

2.3. Динамические особенности строения систем вода-№С1.

2.3.1. Трансляционные движения молекул воды.

2.3.2. Внутримолекулярные колебания в молекулах воды.

Глава.З. Растворы 1-1 электролитов в метаноле.

3.1.Структурные и динамические особенности растворов электролитов в метаноле.

3.2. Функции парного взаимодействия метанол- 1-1 электролит.

3.3. Структурные особенности строения растворов

1Л1 в метаноле.

3.4. Динамические особенности строения растворов 1Л в метаноле.

Глава 4. Структура и динамика трехкомпонентных смесей вода-метанол-ЫаС1.

4.1. Структурные и динамические особенности системы вода-метанол-1ЧаС1.

4.1.1 Теплоемкость тройной системы вода-метанол-№С1. Вклады от различных взаимодействий.

4.1.2. Функции радиального распределения.

4.1.3. Статистика сетки водородных связей.

4.1.4. Ассоциация молекул метанола.

4.2. Динамические особенности строения растворов ИаС в смешанном водно-метанольном растворителе.

4.2.1. Трансляционные движения молекул растворителя.

4.2.2. Внутримолекулярные колебания.