

Interkalaci pyrentetrasulfonové kyseliny do hydrotalcitových vrstev byly získány vzorky, jejichž struktura se analýzou difraktogramu nedá jednoznačně určit. V závislosti na relativní vlhkosti se značně lišilo množství mezivrstevné vody a struktura vzorku. Pro vyřešení struktur byly vytvořeny vhodné postupy a minimalizační strategie v molekulárně mechanických a molekulárně dynamických simulacích, které byly založeny na experimentálních výsledcích z rtg. difrakce. Pro nalezení vhodných iniciálních modelů byl vytvořen postup k použití programu supramol, určeného k deterministickému procházení prostoru možných konformací struktury. Iniciální modely z programu supramol byly následně minimalizovány v programu Cerius2 v silovém poli Universal a případně optimalizovány molekulární dynamikou. Bylo spočítáno uspořádání pyrentetrasulfonových kyselin a vody v mezivrstvě hydrotalcitu pro tři různé vzorky s následujícími mezirovinnými vzdálenostmi: Vzorek 1 připravený při RH = 0%: 9,83Å; vzorek 2 při RH = 84%: 13,63Å; vzorek 3 při RH = 40%–50%: 11,74Å a 12,81Å. Výsledky u těchto struktur prokázaly značnou variabilitu uspořádání molekul v mezivrstvě. Vzorek 3 se jeví jako neustálený.