

ДИНАМИКА ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В МАЛЫХ КЛАСТЕРАХ ВОДЫ (n=3-8)

Белега Е.Д., Трубников Д.Н., Черёмухин Е.А.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Химический ф-т,
каф. физической химии, Россия, 119992, Москва, Ленинские Горы,

МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический ф-т
тел.: (495)-939-45-60, E-mail: elena@phys.chem.msu.ru

Прогресс в понимании поведения многих клеточных наноструктур, важных биохимических реакций и физико-химических свойств воды невозможен без детального изучения динамики сетки водородных связей, образуемых молекулами воды. В последние десятилетия существенную роль в исследованиях свойств кластеров молекул воды играют методы молекулярной динамики.

Методом молекулярной динамики в работе смоделирован переход малых кластеров воды (с числом молекул $n=3-8$) из квазитвердого в состояние «предплавления» с последующим переходом в квазжидкое состояние. Основное внимание уделено устойчивым структурам, характерным для разных температурных диапазонов. Оценены времена жизни конформеров. Взаимодействие между молекулами воды описывалось «жесткими» потенциалами – TIP4P и TIP5P. Геометрия конформеров определялась при анализе матрицы связности графа сетки водородных связей. Структуры, отвечающие глобальным минимумам потенциальной энергии, представлены на Рис.1.

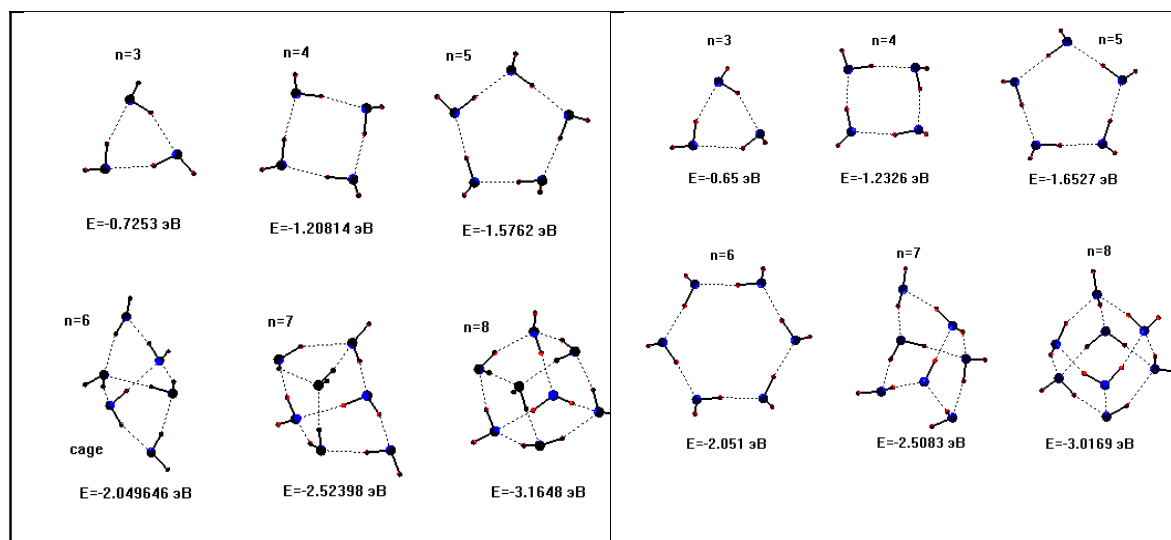


Рис.1. Геометрии кластеров, соответствующие глобальным минимумам потенциальной энергии (TIP4P – слева, TIP5P – справа).