

## ИЗОМЕРИЗАЦИЯ И ПЛАВЛЕНИЕ МАЛЫХ КЛАСТЕРОВ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

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)-939-39-52, E-mail: elena@phys.chem.msu.ru

Вопрос о фазовых переходах в конечномерных системах, к которым относятся кластеры молекул воды, остается открытым. Критерием фазового перехода (например, плавления) в классической термодинамике является наличие пика в температурных зависимостях термодинамических параметров. Процесс плавления в конечномерных системах имеет свои особенности, которые для небольших кластеров молекул воды, в первую очередь, связаны с изомеризацией сетки водородных связей. Остается открытым вопрос, начиная с какого числа молекул в кластере, мы можем говорить о фазовом переходе в классическом смысле. Недавно методом Монте Карло были получены температурные зависимости удельной теплоемкости для гексамера и октомера воды [1], которые показали, что ярко выраженный пик в удельной теплоемкости октомера сопровождается многозначностью распределения потенциальной энергии молекул кластера, чего не было зафиксировано для гексамера воды. Метод молекулярной динамики, примененный в данной работе, позволил обнаружить несколько пиков в распределении потенциальной энергии молекул как гексамера так и октомера. Этот результат может быть объяснен сложной структурой поверхности потенциальной энергии гексамера и тем, что за время наблюдения (0.3-1 нс) кластер имел разную конфигурацию сетки водородной связи.

Опираясь на оба результата, можно сделать выводы:

1. Критерием фазового перехода в малых кластерах молекул воды остается немонотонная температурная зависимость термодинамических параметров.

2. Начиная с октомера воды, можно говорить о фазовом переходе (плавлении) кластера. Кластеры меньших размеров не претерпевают фазового перехода. Для них характерна изомеризация сетки водородных связей, которая не приводит к ярко выраженной немонотонности в поведении термодинамических функций.

Расчеты получены на программе Cluster 1.0. Взаимодействие в кластере описано потенциалами жесткого типа TIP4P и TIP5P.

### Литература.

1. Jungi Yin and D.P. Landau. Structural properties and thermodynamics of water clusters: A Wang-Landau study. The Journal of Chemical Physics 134, 074501 (2011)