

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ДИНАМИКЕ КЛАСТЕРОВ ВОДЫ

Белега Е.Д., Трубников Д.Н., Черёмухин Е.А., Чуличков А.И.¹

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

¹Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Физический ф-т, каф. кафедры компьютерных методов физики

Система, состоящая из большого числа взаимодействующих частиц, приобретает коллективные свойства, которые проявляются в согласованном движении всех ее частиц. Динамика малых кластеров молекул воды может быть описана через динамику сетки водородных связей. В этом случае справедливо будет говорить о коллективных модах движения системы, когда каждая мода в фазовом пространстве представляет собой суперпозицию движения частиц в определенном направлении. Предложенный ранее метод выделения главных мод движения в сложных нелинейных динамических системах (метод эффективных мод [1]), позволяет выделить коллективные моды движения в слабосвязанных атомных и молекулярных кластерах, в частности, в малых кластерах молекул воды.

В работе представлены результаты по изучению коллективных эффектов во внутренней динамике пентамера молекул воды, которые были зафиксированы в ходе численных экспериментов. Кластер молекул воды рассматривался как изолированная система, генерация начальных условий которой осуществлялась методом Монте-Карло. Взаимодействие в кластере описывалось модельным потенциалом жесткого типа (TIP5P), который хорошо зарекомендовал себя при описании свойств воды, включая ее аномальные температурные зависимости. Численное интегрирование уравнений движения проводилось с помощью разностной схемы Верлета. Коллективные моды выделялись при фиксированном значении полной энергии невращающегося кластера. В силу того, что пентамер воды рассматривается как один из вероятных «структурных элементов» жидкой воды, одним из ключевых вопросов данной работы являлся вопрос об основных частотах коллективных колебаний. Полученные в работе две полосы частот: ниже 200 см^{-1} и в области 800 см^{-1} - характерны для внутреннего движения частиц в кластере и колебаний сетки водородных связей, зафиксированных в эксперименте.

Литература

1. Белега Е.Д., Рыбаков А.А., Трубников Д.Н., Чуличков А.И. Эффективная размерность фазовой траектории в задаче визуализации эволюции динамической системы // Журнал вычислительной математики и математической физики. Т. 42, № 12, 2002, С. 1891.