

ПЕРЕСТОЙКА СЕТКИ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ ПРИ ПЛАВЛЕНИИ ГЕКСАМЕРА ВОДЫ

Белега Е.Д., 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

Согласно последним экспериментальным и теоретическим данным наиболее устойчивыми структурами сетки водородных связей гексамера воды являются конформеры типа «книга», «клетка» и «призма» [1]. Это означает, что в «квазитвердой» фазе изолированного кластера сетка водородных связей представлена «объемными» конфигурациями. Вопрос о том, по какому сценарию идет процесс плавления гексамера воды, а именно, какие конформеры характерны при разных энергиях кластера, остается открытым.

В работе представлены результаты изучения перестройки сетки водородных связей при плавлении гексамера воды из «объемных» конформеров методом молекулярной динамики (детали численного эксперимента см. [2]). Обнаружено, что существенным для сценария плавления кластера является не начальная геометрия сетки водородных связей, а вид используемого потенциала (в данном случае: потенциалы «жесткого» типа TIP4P и TIP5P), что хорошо видно из Рис. 1.

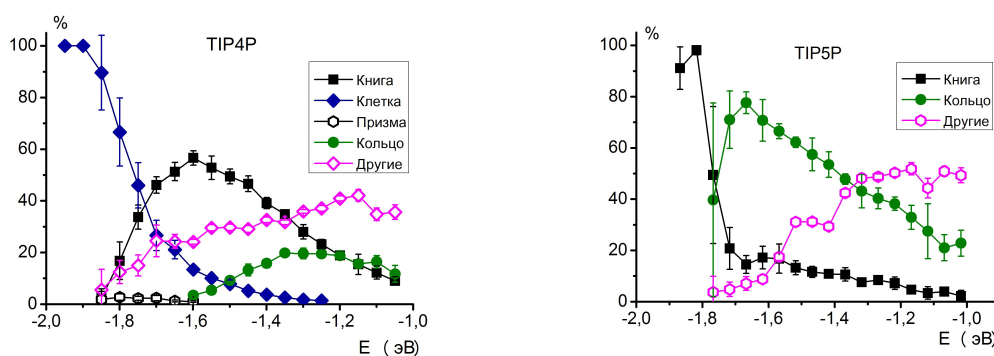


Рис. 1. Доли (%) конформеров при плавлении кластера из конфигурации «клетка» в зависимости от полной энергии E (эВ).

Литература

1. *Richard J. Saykally and David J. Wales. Pinning Down the Hexamer // Science vol. 366, 18 MAY, 2012. P. 814-815.*
2. *Белега Е.Д., Татаренко К.А., Трубников Ж.Н. Черёмухин Е.А. Динамика процесса изомеризации гексамера воды // Физическая химия Т. 28, N 5, 2009. С. 79–84.*