

# ВРЕМЕНА ЖИЗНИ СТРУКТУРНЫХ ИЗОМЕРОВ ГЕКСАМЕРА ВОДЫ

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

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.: (095)939-45-60, факс: (095)939-45-60, e-mail: eacherem@gmail.com

Интенсивное изучение свойств воды привело исследователей к необходимости разработки модели воды на молекулярном уровне. Большое число теоретических работ посвящено построению потенциалов взаимодействия между молекулами воды и расчету структур водных ассоциатов. Однако вопрос о динамике и устойчивости тех или иных структурных изомеров кластеров воды остается открытым.

В работе представлены результаты расчетов средних времен жизни структурных изомеров изолированного гексамера воды и распределение основных изомеров по траектории (Рис.1), выполненные методом молекулярной динамики с модельными потенциалами взаимодействия TIP4P и TIP5P [1]. Расчет средних времен жизни изомеров проводился при фиксированном значении полной энергии невращающегося гексамера воды. Начальная геометрия кластера соответствовала глобальному минимуму потенциальной энергии (cage-изомер - для TIP4P потенциала и ring-изомер - для TIP5P). Обнаружено, что для обоих потенциалов взаимодействия времена жизни изомеров в «квазитвердой» фазе достигают нескольких десятков пикосекунд. При значениях начальной энергии возбуждения ( $E_v = 0.5 \div 0.6$  эВ) кластер переходит в «квазижидкую» фазу с временами жизни изомеров порядка 1 пс.

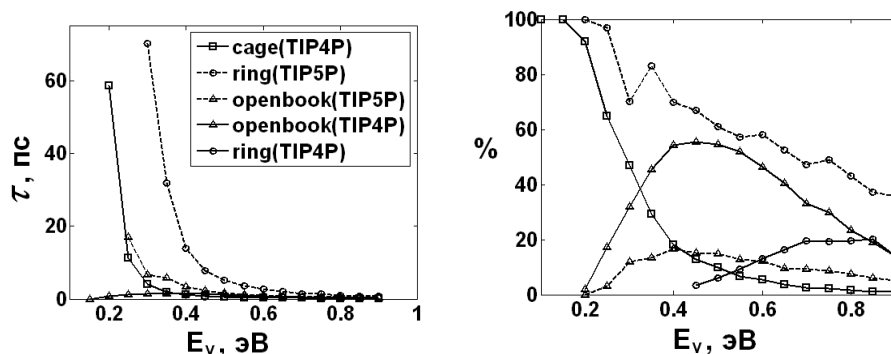


Рис.1. Среднее время жизни  $\tau$  изомеров гексамера воды (слева) и распределение в процентах основных изомеров по траектории (справа)

## Литература

1. Jorgensen W. L., Chandrasekhar J., Madura J. F., Impey R. W., and Klein M. L. Comparison of simple potential functions for simulating liquid water // J. Chem. Phys. V. 79, 1983. P.926.
2. Mahoney M. W. and Jorgensen W. L. A five-site model for liquid water and the reproduction of the density anomaly by rigid, nonpolarizable potential functions // J. Chem. Phys. V.112, 2000. P.8910.