

ЭФФЕКТИВНЫЕ МОДЫ ДВИЖЕНИЯ В КЛАСТЕРАХ 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.:

(095)939-45-60, факс: (095)939-45-60, e-mail: elena@phys.chem.msu.ru

Кластеры воды относятся к слабосвязанным молекулярным соединениям, описание внутренней динамики которых сталкивается с определенными трудностями. Взаимодействие между молекулами воды в кластере носит комплексный и не до конца выясненный характер, поэтому для его исследования используются разные семейства потенциалов. Однако, наличие потенциала в аналитическом виде не облегчает задачи изучения внутренней динамики в кластере. Кластеры воды относятся к классу нелинейных молекулярных систем, для которых стандартное приближение типа «гармонический осциллятор + жесткий ротатор» не приемлемо из-за сильного перемешивания разных типов движения. Один из путей решения этой проблемы связан с изучением динамики сетки водородных связей, что вызывает большой интерес у исследователей из-за роли воды в природе. Существенным препятствием для изучения внутренней динамики кластеров воды является многомерность фазового пространства, в котором описывается траектория движения. Поэтому вопрос о выделении эффективного пространства меньшей размерности, в котором, в основном, и происходит движение системы, является крайне актуальным. В данной работе авторы предлагают подход, основанный на выделении эффективных мод движения нелинейной динамической системы с большим числом степеней свободы, который хорошо зарекомендовал себя при изучении слабосвязанных (ван-дер-ваальсовых) кластеров [1].

В работе представлены результаты по выделению эффективных мод движения в пентамере воды. Расчет траектории в фазовом пространстве осуществлялся методом молекулярной динамики с модельным потенциалом взаимодействия TIP5P [2]. Выбранный для исследования потенциал хорошо зарекомендовал себя при описании свойств воды, включая ее аномальные температурные зависимости. Расчет траектории проводился при фиксированном значении полной энергии невращающегося пентамера воды. Начальная геометрия кластера (изомер «кольцо») соответствовала глобальному минимуму потенциальной энергии. С ростом полной энергии системы зафиксированы пороги изомеризации и фрагментации кластера. На основе выделенных в кластере эффективных мод движения предложен параметр порядка, отражающий изменение размерности эффективного пространства, в котором, в основном, сосредоточено внутреннее движение системы.

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.
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. 2000. V.112, P.8910