

## ФАЗЫ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАЛЫХ КЛАСТЕРАХ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

Белега Е.Д.

МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический ф-т, кафедра физической химии,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские Горы, МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Химический ф-т, тел.: (495)-939-38-55, E-mail: elena@phys.chem.msu.ru

Интенсивные исследования фазовых превращений в конечномерных системах, таких как кластеры, проводятся в последние несколько десятков лет как теоретическими, так и экспериментальными методами. Из-за небольшого числа частиц в системе такие процессы имеют свои особенности. В связи с этим, есть необходимость выделить набор параметров, поведение которых дает возможность говорить о фазовом переходе согласно классической термодинамике. Предложенные в литературе параметры можно сгруппировать в три класса: 1) структурные, которые связаны с изменением внутренней структуры системы при ее нагревании (или охлаждении) [1]; 2) энергетические – отражающие распределение энергии внутри системы [2]; 3) термодинамические – макропараметры, позволяющие фиксировать фазовые превращения в термодинамических системах [3]. Эти параметры дополняют друг друга, но взятые отдельно, не являются достаточными для того, чтобы говорить о фазовом превращении. Основная причина, по мнению автора, связана с тем, что на данный момент понятие «фазы» остается неопределенным, если рассматриваются конечномерные системы.

В данной работе автором предложен подход, позволяющий идентифицировать фазу в конечномерных системах, исследуя динамические характеристики малых кластеров молекул воды. В основе численного эксперимента лежит метод молекулярной динамики, метод Монте-Карло, использованы элементы теории графов. Полученные распределения динамических параметров системы, таких как потенциальная энергия кластера и конкретной молекулы, средняя длина водородной связи, позволили предложить динамические критерии фазового состояния конечномерных систем, а также связать эти параметры со структурными изменениями, которые претерпевает кластер при переходе от одной фазы в другую.

### Литература

1. Belega E. D., Trubnikov D.N., Cheremukhin E.A. Melting of the Water Hexamer // *Journal of Structural Chemistry*. **56**, 2015. PP. 52-57.
2. Wales D. J., Ohmine I. Structure and Dynamics of Model  $(\text{H}_2\text{O})_8$  and  $(\text{H}_2\text{O})_{20}$  Clusters // *J. Chem. Phys.* **98**, 1993. PP.7245-7256.
3. Yin Junqi and Landau D. P. Structural Properties and Thermodynamics of Water Clusters: A Wang–Landau Study // *J. Chem. Phys.* **134**, 2011. PP. 074501(1-9).