

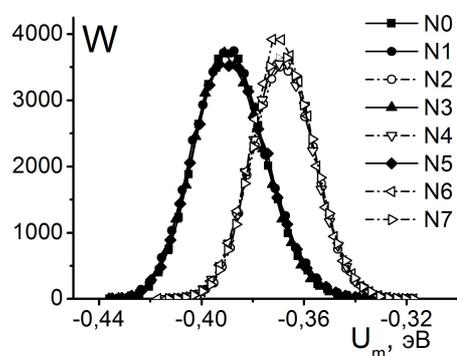
ВЛИЯНИЕ ПОТЕНЦИАЛА НА ДИНАМИКУ КЛАСТЕРОВ ВОДЫ

Белега Е.Д.

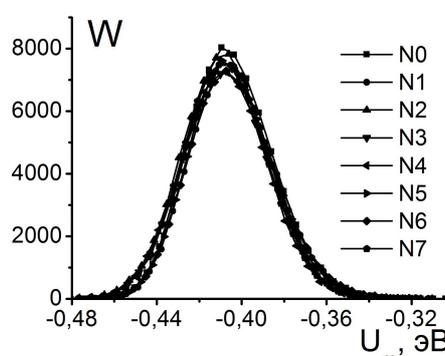
МГУ имени М.В. Ломоносова, Химический факультет
Россия, 119992, Москва, Ленинские Горы, МГУ им. М.В. Ломоносова, Химический ф-т,
тел.: (495)-939-38-55, E-mail: elena@phys.chem.msu.ru

На данный момент разработано несколько десятков потенциалов, которые описывают взаимодействие между молекулами воды. Однако, каждый из этих потенциалов отражает только часть свойств воды, включая кластеры молекул воды.

Подход, представленный в ранних работах [1], позволил предложить критерии фазы (твердой и жидкой) для кластеров молекул воды, которые являются конечномерными системами. При этом все результаты были получены для аналитических потенциалов одного семейства – TIP4P и TIP5P. Цель данной работы – определить, насколько данный подход является универсальным, а именно, независимым от используемого потенциала взаимодействия. В докладе будут представлены результаты численного эксперимента, в ходе которого выявляются особенности динамики молекул в кластерах (гексамере и октамере) в разных фазах (твердой и жидкой) при разных типах потенциала взаимодействия. На рисунке показаны распределения потенциальной энергии молекул (U_m) в октамере воды в твердой фазе для разных потенциалов: TIP4P и SPC/E.



Распределение U_m в октамере воды.
Твердая фаза кластера. Потенциал TIP4P.



Распределение U_m в октамере воды.
Твердая фаза кластера. Потенциал SPC/E.

Литература

1. Белега Е.Д. Фазы и фазовые превращения в малых кластерах молекул воды // МАТЕМАТИКА. КОМПЬЮТЕР. ОБРАЗОВАНИЕ: Сборник научных тезисов, серия 24, АНО НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика" Ижевск 2017, 23 стр.