

## ПЛАВЛЕНИЕ ГЕКСАМЕРА ВОДЫ

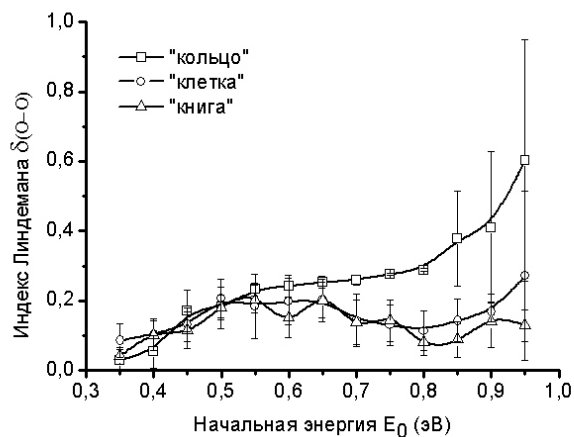
Белега Е.Д.

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](mailto:elena@phys.chem.msu.ru)

Изучение изолированных кластеров воды способствует развитию более точных моделей описания структуры жидкой воды на молекулярном уровне.

Гексамер воды привлекает особое внимание как минимальный элемент льда. Совместные усилия многих экспериментальных и теоретических групп позволили установить структуры изомеров гексамера воды, соответствующие минимальным значениям энергий на потенциальной поверхности [1]. Ими оказались трехмерные конфигурации, которые получили символические названия «клетка», «книга» и «призма».

В данной работе методом молекулярной динамики процесс плавления гексамера воды смоделирован из трехмерных («клетка», «книга») и квазипланарной («кольцо») конфигураций. Взаимодействие между молекулами воды представлено «жестким» потенциалом TIP5P, разработанным для описания плавления льда. Геометрия изомеров определялась через матрицу связности графа сетки водородных связей. Зафиксировано немонотонное поведение индекса Линдемана, отображающего флуктуации длины связи между атомами, в случае плавления кластера из трехмерных конфигураций, что дополняет результаты, полученные в работе [1].



### Литература

1. *Richard J. Saykally and David J. Wales. Pinning Down the Hexamer // Science vol. 366, 18 MAY, 2012. P. 814-815.*

Работа поддержана грантом РФФИ 11-01-12082-офи-м