

## Труды конференций, школ, семинаров

# РАБОЧЕЕ СОВЕЩАНИЕ ПО НАНОКЛАСТЕРАМ ВОДЫ

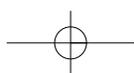
*Московский государственный университет, 17-18 сентября 2009 года*

Совещание проводилось по мотивам недавно опубликованной работы

C. Huang, K. T. Wikfeldt, T. Tokushima, D. Nordlund, Y. Harada, U. Bergmann, M. Niebuhr, T. M. Weiss, Y. Horikawa, M. Leetmaa, M. P. Ljungberg, O. Takahashi, A. Lenz, L. Ojama, A. P. Lyubartsev, S. Shin, L. G. M. Pettersson, and A. Nilsson "The inhomogeneous structure of water at ambient conditions", [www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0904743106](http://www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0904743106),

в которой сообщается о новых результатах о структуре воды, полученных с помощью малоуглового рассеяния синхротронного излучения. На Совещании прошло обсуждение современного состояния проблематики наноразмерных водных кластеров и структурированной воды.

Водным кластерам посвящено большое число экспериментальных, компьютерных и теоретических исследований. Несмотря на значительные успехи, полной ясности по этим проблемам пока нет, как представляется, из-за отсутствия детальных экспериментальных данных о реальной структуре воды. В самое последнее время положение дел изменилось. Подобные данные были получены недавно в лаборатории Stanford Synchrotron Radiation Lightsource, SLAC и the SPring-8 synchrotron facility, Japan. Основным результатом состоит в том, что установлены два типа пространственной организации молекул в жидкой воде, сосуществующие при всех температурах вплоть до температуры кипения. Структура жидкой воды, как установлено, состоит из тетраэдральных образований в виде "комков" (агрегатов, кластеров), образованных примерно 100 молекулами, которые погружены в неупорядоченное, хаотическое окружение. Жидкость в целом является флуктуирующей смесью "тетраэдрально-упорядоченных комков" и "хаотических областей". С повышением температуры число "тетраэдральных комков" убывает, но полностью они не пропадают, а окружающие их хаотические области с увеличением температуры растут. Полученные экспериментальные результаты представляют очевидный интерес не только для теории, компьютерного моделирования и различных молекулярных и квантовомеханических расчетов, касающихся проблематики водных кластеров, но и для многих сопряженных областей. В частности, они могут представлять определенный интерес и для более глубокого понимания той роли, которую вода играет в самоорганизации и функционировании биологических макромолекул.



## Конденсация водяной пленки на поверхности слюды

Багров Д.В., Ефремов Ю.М., Яминский И.В., Шайтан К.В.

*МГУ, Центр перспективных технологий*  
bagrov@polly.phys.msu.ru

Слюда является незаменимым материалом при приготовлении образцов для атомно-силовой микроскопии (АСМ). Она имеет атомарно гладкую поверхность, получаемую путем простого скалывания, эта поверхность является гидрофильной и при помещении в воду приобретает отрицательный заряд. Такая поверхность является хорошей подложкой для наблюдения разнообразных объектов, в том числе биологических (биомакромолекул, вирусов, клеток).

В обычных лабораторных условиях (влажность 30-40%, температура 20-25°C) на поверхности свежесколотой слюды конденсируется водяная пленка. Ее можно наблюдать с помощью АСМ при сканировании в полуконтактном режиме при малой (10-15 нм) амплитуде свободных колебаний кантилевера. Слой воды на слюде возникает в виде отдельных островков высотой 2-3 Å, которые постепенно разрастаются и заполняют всю поверхность образца (рисунок 1). Слабое изменение толщины согласуется с выводом, сделанным ранее авторами работы [1], хотя в ней приводится большее значение толщины слоя ( $0,33 \pm 0,04$  нм), чем то, которое было получено нами. Это расхождение может быть связано с неточностью калибровки микроскопа либо использованием кантилеверов другой жесткости.

В процессе сканирования средняя толщина пленки остается приблизительно постоянной и соответствует толщине монослоя воды (рисунок 2). Существует качественная модель, которая объясняет формирование водяной пленки на образце при сканировании в контактном режиме [2,3]. При сближении кантилевера и образца между ними образуется водный мениск; капиллярная сила, которая при этом действует на кантилевер со стороны образца, на 1-2 порядка больше сил Ван-дер-Ваальса. При боковом смещении кантилевера этот мениск может смещаться вместе с иглой, а может оторваться от нее, при этом на образце остается вода. Такая модель была подтверждена данными низковакуумной растровой электронной микроскопии [4]. Для качественного объяснения формирования пленки в полуконтактном режиме необходимо добавить, что в ходе каждого колебания (над каждой точкой кантилевер совершает ~100 колебаний) водный мениск возникает и разрушается [3]. Поскольку при сканировании в контактном режиме время существования мениска равно времени, потраченному на сканирование кадра, а в полуконтактном режиме оно меньше, то сканирование в контактном режиме в большей степени способствует формированию пленки.

В данной работе для описания кинетики конденсации использовались параметры шероховатости поверхности. Вычисляя значения параметров шероховатости сканируемого участка, можно проследить следующую закономерность: до того, как пленка покрывает половину кадра, шероховатость возрастает, затем начинает убывать. Такая закономерность справедлива для значений средней и среднеквадратичной шероховатости, соответствующие графики представлены на рисунке 3. Каждый из параметров шероховатости стремится к некоторому равновесному значению, которое может варьироваться в зависимости от того, произошло ли формирование цельного слоя (при высокой влажности) или на поверхности остались не покрытые водой участки (при относительно низкой влажности).

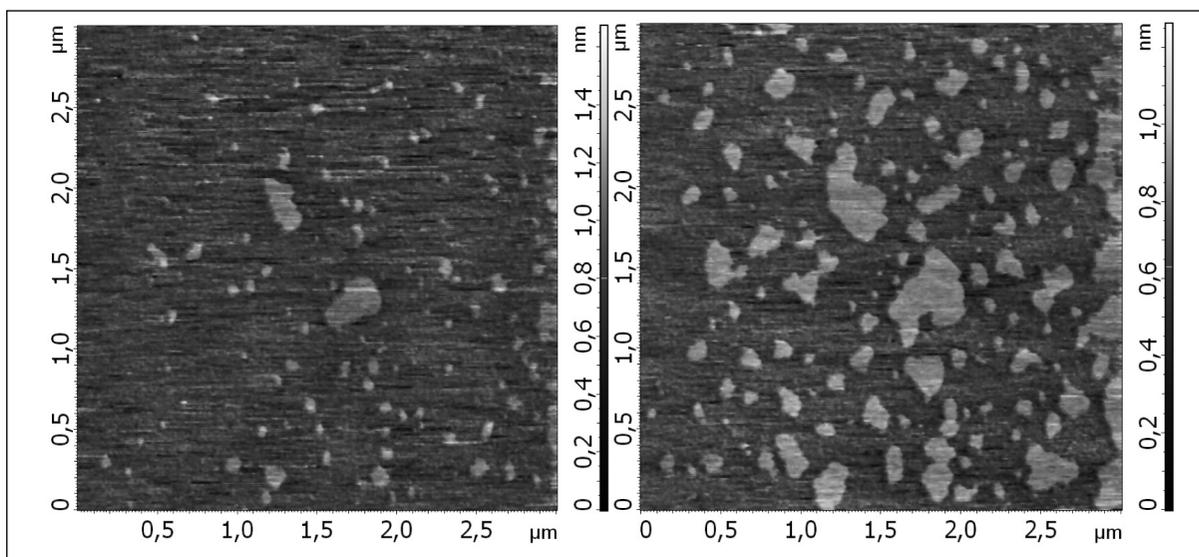
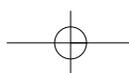


Рис. 1. Постепенное заполнение водяной пленкой сканируемой поверхности слюды.

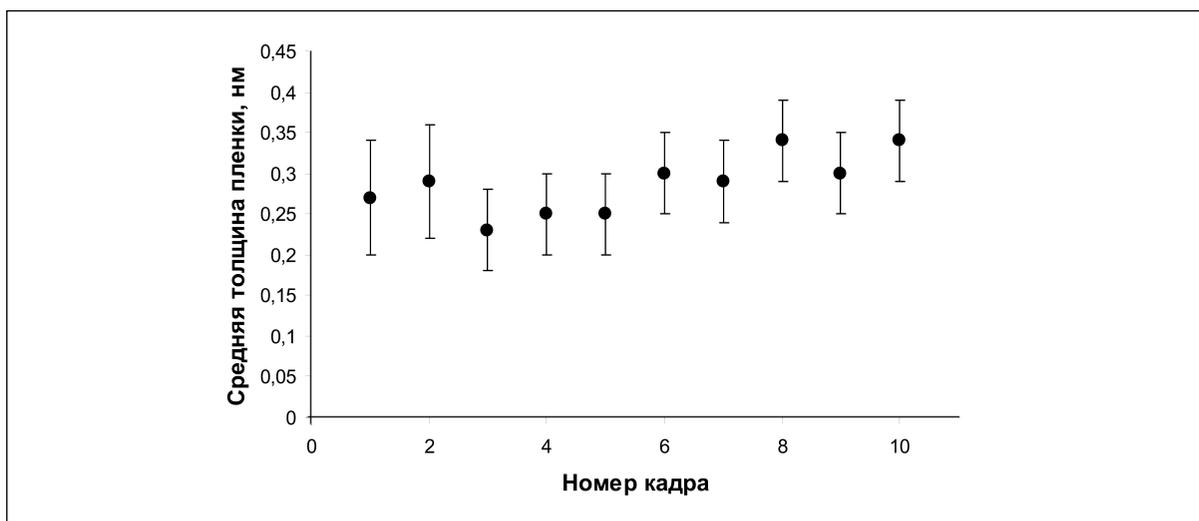


Рис. 2. Изменение средней видимой толщины пленки в процессе сканирования.

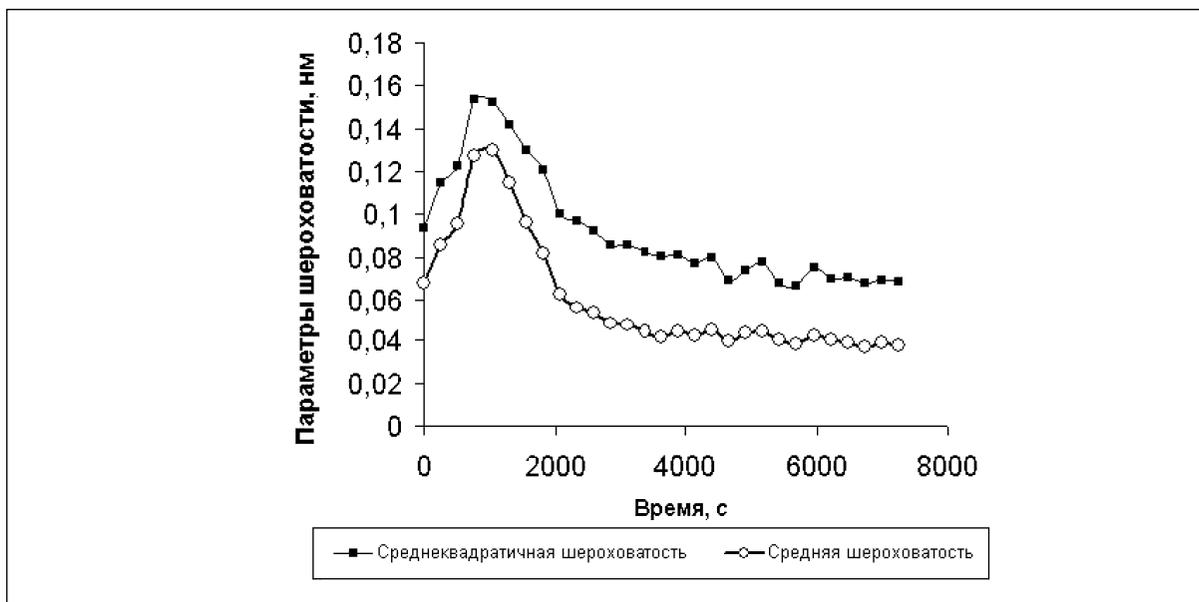
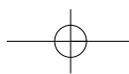


Рис. 3. Изменение параметров шероховатости поверхности при наблюдении водяной пленки.



Итак, толщина водяной пленки на слюде, а также закономерность изменения шероховатости с течением времени указывают, что наблюдаемая пленка представляет собой монослой. Процесс сканирования способствует формированию пленки.

Работа выполнена при поддержке Роснауки (02.512.11.2279 и 02.513.11.3448), Рособразования (НК-37П/11), ФСР МФП НТС (6331р/4994), Научной программы НАТО (CBN.NR.NRSFP 983204) и проекта МГУ-KIST.

### Литература

1. *Spagnoli C., Loos K., Ulman A., and Cowman M.K.* // Journal of the American Chemical Society, 2003, **125**, 7124.
2. *Liu Z., Li Z., Zhou H., Wei G., Song Y., and Wang L.* // Micron, 2005, **36**, 525.
3. *Zitzler L., Herminghaus S., and Mugele F.* // Physical Review B., 2002, **66**(15), 155436 (1 pp).
4. *Schenk M., Fötting M., Reichelt R.* // Journal of applied physics, 1998, **84**(9), 4880.

## Тера- и гигагерцевая четырехфотонная спектроскопия вращений молекул в жидкой воде и водных растворах биополимеров: орто- и параядерные спин-изомеры

А.Ф.Бункин, С.М.Першин

*Институт общей физики РАН*  
[abunkin@orc.ru](mailto:abunkin@orc.ru), [pershin@orc.ru](mailto:pershin@orc.ru)

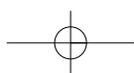
Изложены основы метода четырехфотонной спектроскопии воды и водных растворов биополимеров. Получены спектры четырехфотонного рассеяния лазерного излучения в бидистиллированной воде, водных растворах биополимеров (белки, ДНК), углеродных нанотрубок и перекиси водорода в области  $\sim 250$  см<sup>-1</sup> ( $\sim 8$  ТГц). В этих спектрах зарегистрированы резонансы вращательного спектра молекулы H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> и орто- и парайзимеров молекулы H<sub>2</sub>O. Обнаружена селективность взаимодействия биомолекул с парайзимерами H<sub>2</sub>O, а также возрастание скорости звука в водных растворах биополимеров при повышении их концентрации до единиц процентов.

## Возможное участие «горения воды» в аэробном дыхании и в самоочистке природных вод

В.Л. Воейков

*Биологический факультет МГУ*

Аэробное дыхание можно рассматривать как восстановление кислорода до воды атомами водорода, поставляемыми соответствующими донорами. Недавно было обнаружено (G.H. Pollack, Univ. of Washington, Seattle), что вода, смачивающая гидрофильные поверх-



ности, отличается по многим физическим и химическим свойствам от обычной («объемной») воды. В частности, пограничная вода может служить донором электронов. В условиях, когда акцептором электронов может служить растворенный в объемной воде кислород, в водной системе протекает своеобразный процесс, представляющий собой, по существу, «горение воды». «Горение воды», как и любое другое горение сопровождается освобождением энергии высокой плотности, порции которой эквивалентны энергии фотонов видимого и даже УФ-света. В живой материи, где существенная часть воды представлена пограничной водой, этот процесс служит источником свободной энергии высокого качества, обеспечивающей реализацию жизненных функций. Однако устойчивое протекание этого процесса требует присутствия катализаторов. Мы обнаружили, что в водных растворах бикарбонатов окисление воды («горение воды»), сопровождаемое сверхслабым излучением, может протекать без затухания в течение многих месяцев в отсутствие освещения и в герметично закрытых сосудах. Процесс, протекающий в водных растворах бикарбонатов, обнаруживает высокую чувствительность к действию физических и химических факторов крайне низкой интенсивности. Хорошо известно, что  $\text{CO}_2$  и бикарбонаты играют ключевую роль в осуществлении клеточного дыхания, которое может быть заблокировано при их дефиците. Однако механизм их действия на молекулярном уровне остается неизвестным. Мы предполагаем, что участие карбонатов в переносе электронов от обладающей электрон-донорными свойствами пограничной воды, на кислород может в значительной мере прояснить необходимость карбонатов для потребления кислорода и обеспечения энергетических потребностей живых организмов.

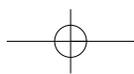
Исследования последних лет показали также, что карбонаты играют важную роль и в самоочистке природных вод от ксенобиотиков благодаря их способности превращаться в свободно-радикальные формы в присутствии соответствующих доноров электронов. Можно предположить, что применение различных подходов, повышающих электронно-донорную емкость воды, должно повысить эффективность самоочистки природных вод при наличии в них карбонатов.

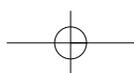
## **Динамика поверхностного взаимодействия липидных бислоев с мембранактивными белками и пептидами**

О. Левцова

*Биологический факультет МГУ*

В работе рассматривается взаимодействие ряда мембранактивных белков и пептидов (антибиотиков, токсинов и белков изменяющих кривизну мембраны) с поверхностью липидного бислоя методами молекулярной динамики на двух уровнях детализации: полноатомном и крупно-зернистом. Сравняется роль водного окружения в двух моделях и описываются возможные артефакты использования крупно-зернистой модели воды. В работе анализируются недостатки и преимущества обеих моделей и предлагается способ комбинированного использования.





## Структурный баланс в воде при воздействии внешних физических факторов

Э.А.Манькин, В.Б.Ошурко, А.А.Ропяной, А.Н.Федоров

Как хорошо известно, вода обладает рядом аномальных физических свойств, проявляющихся в большом количестве нетривиальных эффектов. Все эти аномалии имеют большое количество различных и нередко противоречащих друг другу объяснений. Недавно, на основе новых данных по нелинейному поглощению ИК-резонансного излучения и нелинейной фотоакустики нам удалось показать, что эти аномалии могут быть объяснены на основе одного (экспериментально установленного) факта: между двумя подсистемами (льдоподобной и «более свободной») существует положительная обратная связь; это, как оказалось, связь между электролитической диссоциацией и образованием гидратных облочков ионов (с измененной структурой водородных связей) в воде. В настоящее время обнаружен ряд новых явлений: образование разделенного заряда при ОН-резонансном лазерном воздействии; появление низкочастотных (~1 Гц) резонансов проводимости воды во внешнем электрическом поле; горение воды на воздухе в радиочастотном поле. Как оказалось, все эти новые факты также могут объясняться существованием указанного выше простого механизма. В докладе обсуждаются применения предложенной модели воды к новым результатам и возможные новые эффекты.

## От кластерных анионов воды к неэмпирической оценке энергии гидратации электрона

Ю.В. Новаковская

*Химический факультет МГУ*

К настоящему времени экспериментально получены практически все кластерные анионы воды  $(\text{H}_2\text{O})_n^-$  с  $n=2\dots 100$ , и характер сольватации электрона в них не претерпевает радикальных изменений при увеличении числа молекул, а положение и профиль их полос поглощения отчетливо и монотонно приближаются к спектру поглощения гидратированного электрона в воде. Следовательно, изучая отдельные кластерные анионы воды, можно приблизиться к описанию состояния гидратированного электрона и оценке его энергии.

С учетом особенностей связывания электрона ориентированными диполями определены устойчивые конфигурации кластерных анионов воды и оценены вертикальные энергии их ионизации (которые могут быть измерены экспериментально). Для описания релаксации структурных фрагментов сетки водородных связей при локализации избыточного электрона предложен модельный подход, в котором эффективно учтено ограничивающее влияние окружающих слоев молекул воды. С помощью соответствующих неэмпирических расчетов кластеров воды  $(\text{H}_2\text{O})_n^-$  и  $(\text{H}_2\text{O})_n$  с  $n \leq 16$ , показано, что при наличии трехмерной сетки молекул процесс релаксации дефекта структуры после введения дополнительного электрона или его удаления из системы может быть обратимым. Рассчитанные вертикальные энергии отрыва электрона от анионных структур воды и энергии сольватации электрона нейтральными системами в сочетании с анализом распределения электронной плотности высшей занятой молекулярной орбитали анионов позволили предложить оценки энергии фотоионизации



ционного удаления электрона из объема и из поверхностных слоев воды ( $4.4 \pm 0.2$  и  $3.0 \pm 0.2$  эВ соответственно) и энергии гидратации электрона ( $2.6 \pm 0.2$  эВ).

## Трехжидкостная вода: смесь ансамблей гексамерных, тетрамерных и «короткоживущих» кластеров с изменчивой структурой

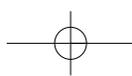
С.М.Першин

*Научный центр волновых исследований ИОФ РАН, pershin@orc.ru*

Методом комбинационного рассеяния (КР) одиночных 10 нс и коротких ( $n=1-7$  с секундным интервалом) цугов импульсов 2-й гармоники Nd:YAG лазера в воде с интенсивностью поля в кювете  $\sim 1$  МВт/см<sup>2</sup> в нормальных условиях обнаружено расщепление полосы валентных ОН колебаний щелью до  $100$  см<sup>-1</sup> на частоте  $3340$  см<sup>-1</sup>, а также новое физическое явление – гармонические колебания гравитационного центра ОН полосы с амплитудой до  $50$  см<sup>-1</sup> и периодом  $35 \pm 13$  секунд без заметного затухания в течение 16 минут. Увеличение дозы (числа импульсов в цуге) облучения приводит к уменьшению глубины щели и амплитуды колебаний центра. Выборка спектров с максимальным отклонением центра формирует ОН полосу, подобную спектру КР массивного гексагонального льда Ih с характерной частотой гексамеров [1]  $\sim 3220$  см<sup>-1</sup> и перегретой (относительно комнатной) воды -  $\sim 3420$  см<sup>-1</sup> (тетрамеров [1]). Обнаруженное расщепление позволило применить двухжидкостную модель [2] и двухуровневое приближение для расчета коэффициента [3] температурного сдвига центра ОН полосы, значение которого  $\sim 1$  см<sup>-1</sup>/град хорошо совпадает с измеренным нами ранее [4]. Существенно, что зазор между максимумами компонент  $\sim 200$  см<sup>-1</sup> сравним с тепловой энергией  $kT$ , что может обеспечивать флуктуационный безизлучательный обмен между ансамблями при столкновении молекул с сохранением полной энергии. Отсюда следует, что физический механизм обнаруженного явления бездиссипативных гармонических колебаний гравитационного центра ОН полосы обусловлен фазовым переходом второго рода с изменением параметра порядка: перестройкой структуры «кристаллических» каркасов гексамерных льдоподобных кластеров меньшей плотности в структуру тетрамерных кластеров воды большей плотности. Колебания центра ОН полосы в переохлажденной воде имеют, по видимому, такую же природу [5]. При этом бóльшая (усредненный контур ОН полосы) часть молекул, число которых увеличивается при увеличении дозы воздействия, в стадии перехода находится в состоянии короткоживущих кластеров и квази-свободном состоянии. Некоторые из них свободно вращаются, что следует из спектров вращения, зарегистрированных нами впервые [6]. образом, обнаруженные три доминанты ОН полосы: основное ядро и компоненты с характерными частотами гексамеров и тетрамеров позволяют заключить, что вода есть трехжидкостная смесь в состоянии динамического равновесия.

### Литература

1. Mishaut X., Vasserot A-M., Abouaf-Marguin L. // *Vibr. Spectrosc.*, 2004, **34**, 83.
2. Pershin S.M. // *Laser Physics*, 2006, **16**(7), 1; *Phys. Wave Phenomena*, 2005, **13**(4), 192.
3. Першин С.М. // Докторская диссертация, НИИЯФ МГУ, 1998.
4. Бункин А.Ф., Першин С.М. // Патент России, № 98 103249, 1998
5. Першин С.М. // *Оптика и Спектроскопия*, 2004, **96**(6), 885.
6. Bunkin A.F., Pershin S.M. // *Laser Phys. Lett.*, 2007, **4**, 656.





## Гексамерные кластеры в воде при увеличении температуры до 98 °С

С.М. Першин<sup>1</sup>, А.Ф. Бункин<sup>1</sup>, В.А. Лукьянченко<sup>1</sup>, Р.Р. Нигматуллин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Научный центр волновых исследований ИОФ РАН,

<sup>2</sup>Казанский государственный университет

pershin@orc.ru

Предложен и разработан новый метод анализа спектров комбинационного рассеяния (КР) с вычитанием обобщенного среднего, позволяющий существенно повысить чувствительность к малым составляющим. Спектры суммировались по 100 импульсам второй гармоники Nd-YAG лазера (10нс). Выявлены стабильные спектральные компоненты, частоты которых отнесены к водородосвязанным молекулярным комплексам гексамерных ( $3220\text{ см}^{-1}$ ) и тетрамерных ( $3420\text{ см}^{-1}$ ) кластеров [1] в воде при увеличении её температуры от 10 до 98 °С.

В основе подхода лежит представление спектра в виде суммы медленно- и быстродиспергирующих компонент. Медленнодиспергирующая компонента вычисляется с помощью метода обобщенного среднего [2] и вычитается из измеренного спектра [3]. Разностный спектр имеет провал на частоте  $3340\text{ см}^{-1}$  и компоненты  $3220\text{ см}^{-1}$  и  $3420\text{ см}^{-1}$ , как при расщеплении ОН полосы [1]. Однако оставалось неясным, при каких температурах льдоподобные гексамерные кластеры будут полностью разрушены и их вклад в огибающую ОН полосы будет несущественным. Мы установили, что при повышении температуры воды от 10 до 98 °С характерные частоты обнаруженных компонент оставались прежними. При этом амплитуда льдоподобных кластеров уменьшалась, но оставалась надёжно детектируемой. Амплитуда второй компоненты увеличилась, ее спектр обогатился частотами димеров ( $3600\text{ см}^{-1}$ ) и тримеров ( $3530\text{ см}^{-1}$ ) [4]. Таким образом, впервые, насколько нам известно, экспериментально обосновано, что льдоподобные комплексы существуют в воде вплоть до температуры кипения.

### Литература

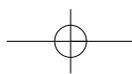
1. Pershin S.M. // Laser Physics, 2006, **16**(7), 1; Phys.Wave Phenomena, 2005, **13**(4), 192.
2. Nigmatullin R.R. and Smith G. // J. Phys. D, 2005, **38**, 328.
3. Pershin S.M., Bunkin A.F., Lukyanchenko V.A., Nigmatullin R.R. Detection of the OH band fine structure in liquid water by means of new treatment procedure based on the statistics of the fractional moments // Laser Phys. Lett., **2007**, **4**(11), 808-813.
4. Першин С.М., Адикс Т.Г., Лукьянченко В.Г., Нигматуллин Р.Р., Потапов А.А. // Нелинейный мир, 2009, **7**(2), 79.

## Структура воды: новые экспериментальные данные

А.Н. Смирнов

МИРЭА, [a.n.smirnov@mail.ru](mailto:a.n.smirnov@mail.ru)

Многочисленные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что влияние слабых воздействий (электрических, магнитных полей и др.) на биологические объекты



осуществляется через их водные среды. Вероятно, причиной являются структурные перестройки в биологических водных системах.

В работе изложены новые экспериментальные факты, свидетельствующие об образовании супранадмолекулярных (СНМ) комплексов с линейными размерами 3-100 мкм и временем релаксации свыше одной секунды. Их существование подтверждено акустической эмиссией (АЭ), оптическим и термическим методами в воде высокой степени очистки.

При построении различных моделей жидкой воды опускается факт постоянного наличия в ней гидратированных ионов водорода и гидроксидов.

Эти ионы играют решающую роль в создании структуры воды. Они образуют как бы сверхрешетку из СНМ-комплексов и благодаря дальнедействию электростатических сил, обеспечивают стабилизацию ансамбля и его чуткое реагирование на любые внешние воздействия (электромагнитные, акустические, тепловые и др.). Изменения размерных спектров супранадмолекулярных комплексов воды в зависимости от pH и ионной силы растворов подтверждают этот вывод. Для визуализации СНМ комплексов применен новый подход с использованием лазерного излучения, позволяющего уловить незначительную разницу в показателях преломления двух «фаз» воды. Наличие супранадмолекулярных комплексов в воде позволяет объяснить многие экспериментальные факты, которые ранее не имели стройного, логичного обоснования. При 4°C СНМ-комплексы плотно упакованы и образуют текстуру, напоминающую «паркет». Как известно, вода при этой температуре имеет максимальную плотность. При повышении температуры до 20°C в структуре воды происходят существенные изменения — число свободных СНМ-комплексов становится максимальным. Затем, при дальнейшем повышении температуры они постепенно разрушаются, число их уменьшается, и этот процесс в основном заканчивается при 75°C, как известно, при этой температуре скорость звука в воде имеет максимальную величину.

Реальность структурных образований в воде подтверждена классическим методом дифференциального термического анализа, который позволил также обнаружить пики при 36°C, 42°C и 62°C. Хорошо известно, что эти аномальные точки связаны с термодинамическими свойствами воды при этих температурах: минимальной теплоемкостью  $C_p$ , минимальной сжимаемостью и др.. Обнаруженные в настоящей работе супранадмолекулярные комплексы вносят существенные коррективы в представления о структуре воды. Они непротиворечиво включают в себя все ранее полученные экспериментальные факты, касающиеся организации  $H_2O$  в нанобъемах с временами релаксации на 5 и, соответственно, 10 порядков меньшими, чем таковые для СНМ комплексов. Супранадмолекулярные комплексы построены из десятков тысяч молекул воды сгруппированных вокруг ионов  $H^+$  и  $OH^-$ .

Наличие супранадмолекулярных комплексов в воде позволяет объяснить многие экспериментальные факты, которые ранее не имели стройного, логичного обоснования. Например, феномен образования «парящего водяного мостика», описанный в работах [1,2]. Этот феномен и все его необычные свойства являются следствием наличия в воде супранадмолекулярных комплексов с размерами от 3 до 100 мкм. Количество и размеры СНМ комплексов меняются с температурой (рис. 1).

Дано объяснение аномальных свойств талой воды и получено его экспериментальное подтверждение методом акустической эмиссии рис. 3.

Как нами впервые установлено, после полного плавления льда (см. рис.3) и сама жидкая среда «таящая вода», находящаяся в метастабильном состоянии, становится источником АЭ, что является экспериментальным подтверждением образования в воде супранадмолекулярных (СНМ) комплексов [3-5].

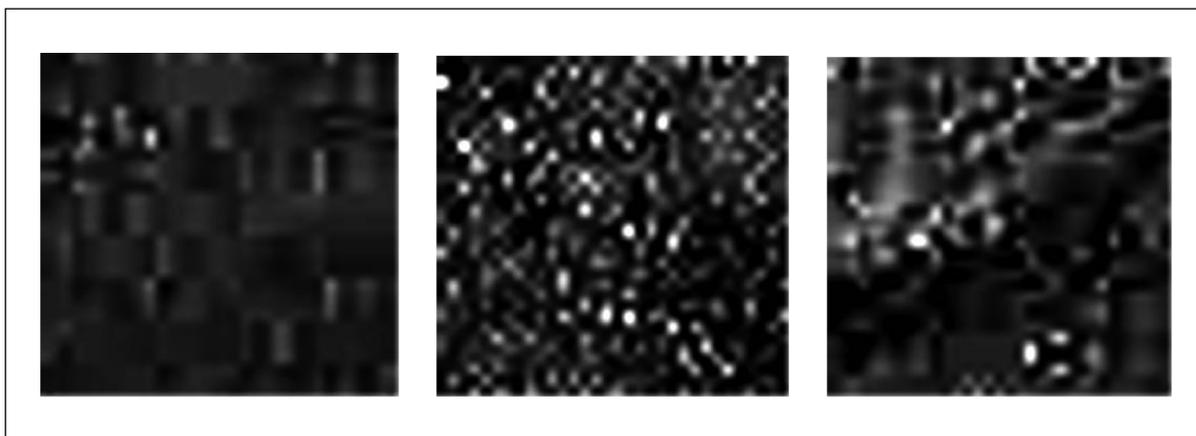


Рис. 1. Структура воды при различных температурах (сторона кадра 2 мм).

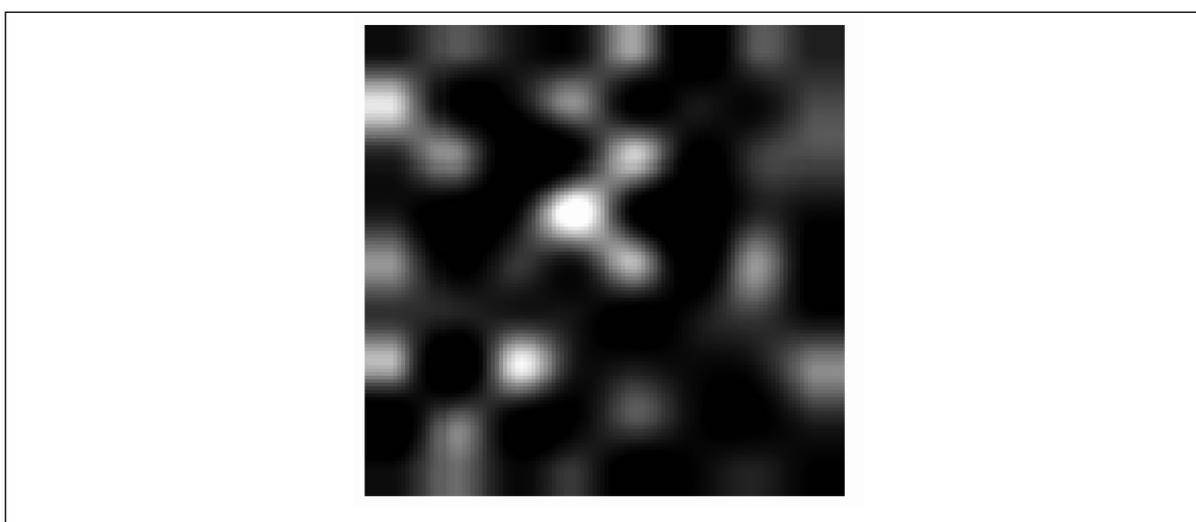


Рис. 2. Структура воды при максимально достигнутом увеличении. Размер изображения по горизонтали соответствует 400 мкм, 20 °С.

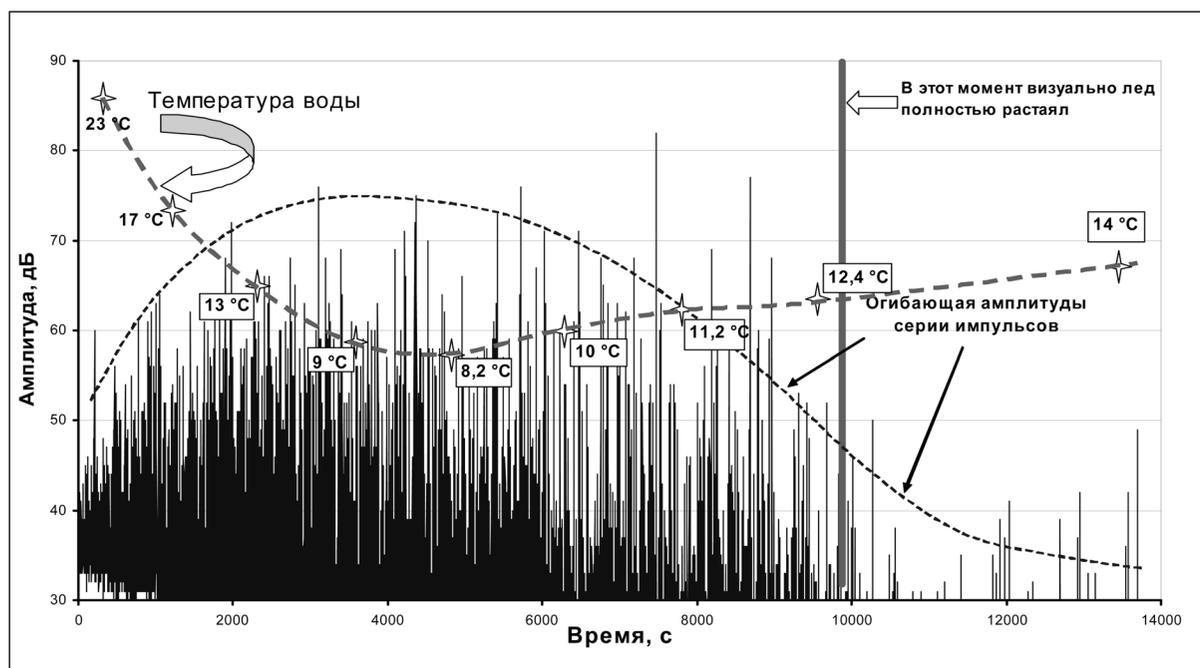
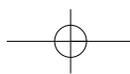
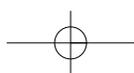


Рис. 3. Изменение амплитуды сигналов АЭ и температуры воды в процессе таяния льда





### Литература

1. *Elmar C. Fuchs et al.* The floating water bridge // J.Phys.D., 2007, **40**, 6112 (4 pp).
2. *Elmar C. Fuchs et al.* Dynamic of the floating water bridge // J.Phys.D, 2008, **41**, 185502 (5pp).
3. *Смирнов А.Н.* Акустическая эмиссия при протекании химических реакций и физико-химических процессов // Российский химический журнал, 2001, **45**, 29-34.
4. *Кузнецов Д.М., Гапонов В.Л., Смирнов А.Н.* О возможности исследования кинетики фазовых переходов в жидкой среде методом акустической эмиссии // Инженерная физика, 2008, **1**, 16-20.
5. *Смирнов А.Н., Сыроешкин А.В.*, Супранадмолекулярные комплексы воды // Российский химический журнал, 2004, **58**, 125-135.

## Анализ внутренней динамики малых кластеров воды

Е.Д. Белега<sup>1</sup>, Д.Н. Трубников<sup>1</sup>, Е.А. Черёмухин<sup>1</sup>, А.И. Чуличков<sup>2</sup>

*Химический факультет МГУ<sup>1</sup>, [edbelega@gmail.com](mailto:edbelega@gmail.com),  
[eachere@gmail.com](mailto:eachere@gmail.com) [tdn@phys.chem.msu.ru](mailto:tdn@phys.chem.msu.ru),  
Физический факультет МГУ<sup>2</sup>, [ach@cmp.phys.msu.ru](mailto:ach@cmp.phys.msu.ru)*

Настоящая работа посвящена исследованию внутренней динамики малых кластеров воды ( $n=3-6$ ) на основе моделирования методом классической молекулярной динамики с использованием потенциала взаимодействия TIP5P [1]. Основной целью работы является анализ коллективного движения не вращающихся кластеров в разных фазах при помощи метода главных компонент [2]. Основная идея этого метода состоит в разложении движения системы в  $n$ -мерном фазовом пространстве (или подпространстве) в  $m$  ( $m=1,2,\dots,n$ ) ортогональных компонент (эффективных мод), таких, что их суперпозиция аппроксимирует траекторию наиболее точно. Метод позволяет эффективно уменьшить размерность фазового пространства и дать ключ для понимания поведения сложных нелинейных систем. В процессе работы были установлены энергетические диапазоны существования фаз кластеров, выявлены основные структурные изомеры и их средние времена жизни в зависимости от полной энергии, рассчитаны распределения энергии по эффективным модам и установлена их связь с внутренней температурой кластеров.

### Литература

1. *Mahoney M.W., Jorgensen W.L.* // J. Chem. Phys., 2000, **112**, 8910.
2. *Белега Е.Д., Рыбаков А.А., Трубников Д.Н., Чуличков А.И.* // ЖВМ и МФ, 2002, **42**, 1817.