

УДК 533:004.94

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ЦЕПОЧЕК ВОДЫ

Н.М. КАЛИНОВСКАЯ, И.И. МЕЛЬНИКОВ

Научные руководители И.В. ТЕРЕШКО, канд. физ.-мат. наук, доц.;

А.В. ХОМЧЕНКО, д-р физ.-мат. наук, доц.

ГУ ВПО «БЕЛОРУССКО-РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Известно, что нанометровый диапазон (1–100 нм) привлекает внимание специалистов различных областей: физик, химии, медицины, техники и т.д. и выделяется в междисциплинарную область науки – нанотехнологию. В частности, активно развивается метод, основанный на использовании свойств материалов и учете их коллективных эффектов при развитии процессов самоорганизации.

Авторами была разработана компьютерная модель процессов самоорганизации в нелинейных молекулярных цепочках. В качестве объекта исследования были выбраны молекулярные цепочки воды. В модели применялись методы молекулярной динамики. Все типы взаимодействия относятся к низкоэнергетическим, так как главная задача при этом – не разорвать атомную или молекулярную цепочку, а создать условия в ней для возбуждения нелинейных колебаний атомов и молекул после прекращения внешнего облучения.

Для проведения вычислительного эксперимента была разработана компьютерная программа с использованием математического пакета MatLAB 6.5, которая, сочетая в себе удобный пользовательский интерфейс и компьютерную модель процессов самоорганизации, позволила осуществить вычислительный эксперимент. При этом использовались потенциалы двух типов: Морзе и Борна-Майера. Количество молекул воды варьировалось от 2 до 8 (6–24 атомов); скорость, получаемая первым атомом молекулярной цепочки при одиночном ионном ударе варьировалась от 1000 до 1600 м/с. Во всех случаях смещение всех атомов цепочки настолько значительно, что ведет к сжатию цепочки, что также можно назвать коллапсом цепочки, или формированию высокоэнергетических нанокластеров. Было установлено, что длина сколлапсированной цепочки зависит от энергии внешнего воздействия и существует структура с минимальной длиной цепочки при определенной энергии воздействия. Для случая цепочки, состоящей из 8 молекул воды, минимальная длина цепочки наблюдалась при скорости 1200 м/с.

Таким образом, компьютерное моделирование показало, что в молекулярных цепочках воды после низкоэнергетического ионного воздействия наблюдается явление коллапса цепочек с образованием высокоэнергетического нанокластера.