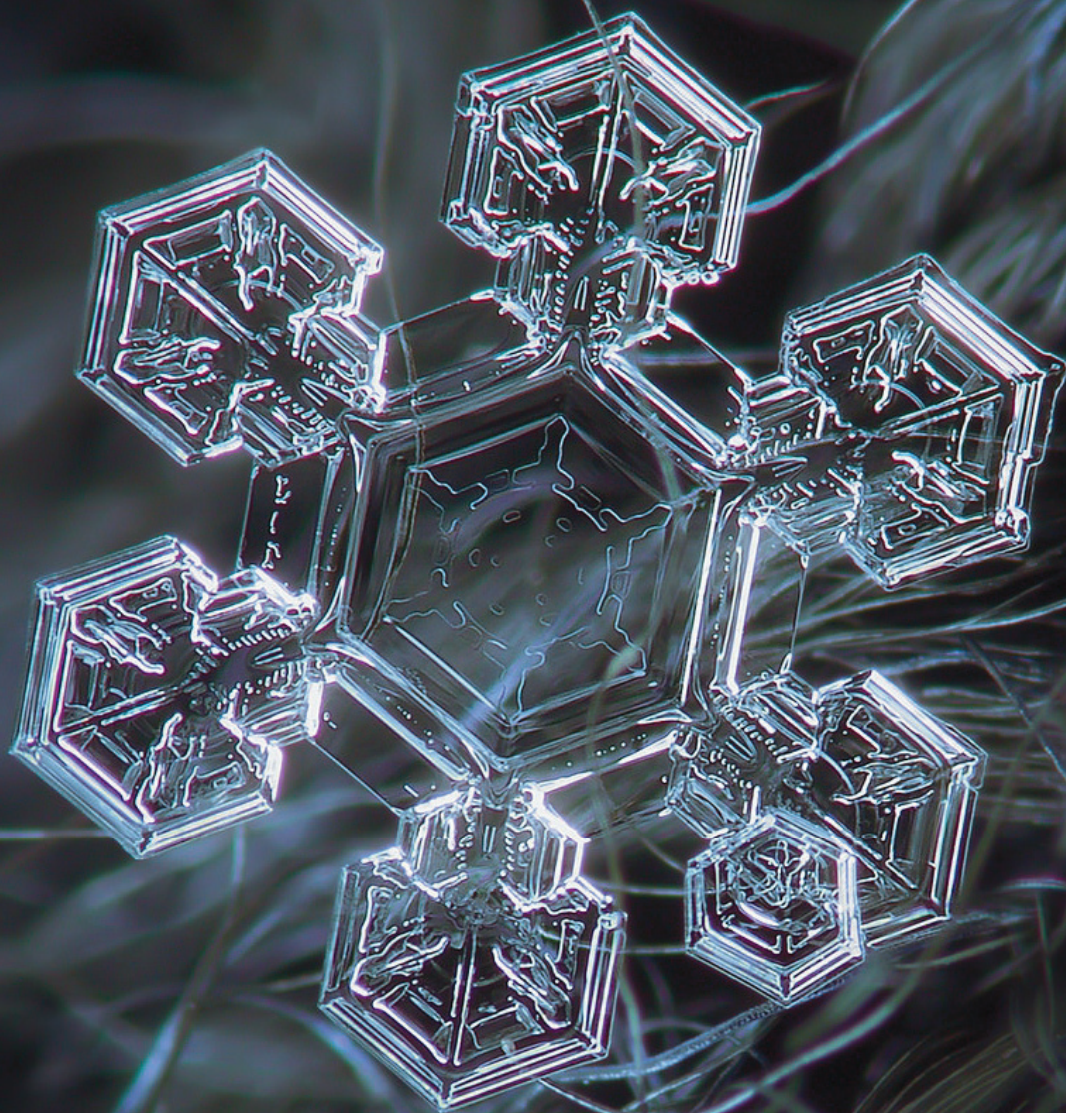


XVII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА–СЕМИНАР
по проблемам физики
конденсированного состояния вещества
(СПФКС – 17)



15 – 22 ноября 2016 года
Екатеринбург

Российская академия наук
Уральское отделение Российской академии наук
Федеральное агентство научных организаций
Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН
Институт теплофизики УрО РАН
Институт электрофизики УрО РАН
Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина



Тезисы докладов

XVII Всероссийская школа—семинар
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
(СПФКС–17)

15–22 ноября 2016 года

г. Екатеринбург
2016

ОРИГИНАЛЬНЫЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Б.Н. Галимзянов^{1,2*}, А.В. Мокшин^{1,2}

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва, Россия

*e-mail: bulatgnmail@gmail.com

Известно, что на структурные свойства неупорядоченных конденсированных систем существенное влияние оказывает характер межатомных (или межмолекулярных) взаимодействий. Информация о структуре системы, как правило, извлекается посредством расчета парных или трехчастичных корреляционных функций распределения [1,2]. При этом трехчастичные корреляции крайне сложно оценить непосредственно из эксперимента. Поэтому более полную информацию о трехчастичных корреляциях в многочастичных системах можно получить на основе данных моделирования молекулярной динамики [2].

В настоящей работе предложен оригинальный метод трехчастичного структурного анализа, суть которого заключается в рассмотрении корреляции в расположении трех произвольных частиц (т.е. атомов, молекул) системы. А именно, с геометрической точки зрения, любые три частицы образуют в пространстве треугольник (или триплет), который характеризуется площадью S , являющейся скалярной величиной. На примере известной одноатомной модели воды, где межмолекулярные взаимодействия воспроизводятся с помощью модифицированного анизотропного потенциала Стиллинджера-Вебера [3], показано, что этот метод позволяет выполнить структурный анализ результатов молекулярно-динамических расчетов, а также охарактеризовать динамику трехчастичных корреляций.

Для выполнения структурного анализа в настоящей работе вводится трехчастичная корреляционная функция следующего вида

$$g(S) = \frac{1}{N_T} \left\langle \sum_{i=1}^{N_T} \delta(S - S_i) \right\rangle, \quad (1)$$

где N_T — есть количество триплетов. С помощью функции распределения (1) выполнен анализ трехчастичных корреляций как в жидкой, так и в переохлажденной воде при температурах от 160 K до 320 K (при постоянном давлении 1 атм). Обнаружены устойчивые трехчастичные корреляции, формирующие первую и вторую координационные оболочки, несмотря на слабые трехчастичные корреляции в динамике площади отдельно взятого триплета. Также показано наличие межчастичных корреляций в переохлажденной воде, охватывающих третью координационную оболочку, которые сложно выявить с помощью парных функций распределения частиц.

Работа частично поддержана РФФИ (грант № 14-02-0335). Молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и на вычислительном кластере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра РАН.

1. D. Kashchiev. Nucleation: Basic Theory with Applications. — Butterworth-Heinemann: Frenkel Oxford (2000).
2. N.H. March, M.P. Tosi. Atomic dynamics in liquids. — New-York: Dover (1991).
3. A.V. Mokshin, B.N. Galimzyanov. J. Phys. Chem. B **116**, 11959 (2012).