



**XVIII Международная школа-конференция
"Проблемы физики твердого тела
и высоких давлений"**

**Идеи и методы
физики
конденсированного
состояния, III**

**Сочи, пансионат "Буревестник"
18-29 сентября 2019г.**

ТЕЗИСЫ

XVIII Школа-конференция молодых ученых "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений" продолжает регулярную серию школ, которые проводились Институтом физики высоких давлений РАН каждые два года, начиная с 1989г. С 2015 года Школа-конференция проводится ежегодно совместно с Физическим институтом РАН. В данный сборник входят как тезисы лекций приглашенных лекторов, так и тезисы оригинальных докладов молодых участников.

ТВ
ВЬ
ДЕ
П
ОС
Г
«
К
К
В
С
И
2
«
С
Ф
В
О
Д
У
М
Н
П
У
У
С
Д

ПРОЦЕССЫ ЭЛЕКТРОКРИСТАЛЛИЗАЦИИ В АМОРФНОМ ЛЬДЕ

Хуснутдинов Р.М. и Мокшин А.В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
e-mail: khrm@mail.ru*

В последние годы исследование свойств воды в конфайнменте привлекает особое внимание ученых из-за ее важности для понимания многих биологических и геологических процессов, таких как: процессы, происходящие в мембранах и клетках; транспортные процессы в порах; капиллярные явления; динамические процессы при высоких давлениях, осуществляемые в недрах спутников некоторых планет Солнечной системы.

В данной работе моделированием молекулярной динамики мы изучаем влияние внешнего электрического поля на гомогенное зародышеобразование льда в переохлажденной воде, заключенной между двумя графеновыми слоями. Исследуемая система состояла из 1152 атомов углерода, формирующие графеновые слои и 1530 молекул воды. Взаимодействие между молекулами воды осуществлялось с помощью модельного потенциала Tip4p/Ice [1], которая, как было показано в работе [2], корректно воспроизводит фазовую диаграмму. Для фиксации внутримолекулярных связей применялся SHAKE-алгоритм [3]. Для расчета энергии электростатических взаимодействий использовали PPPM-метод [4] с радиусом усечения $r_c=13\text{\AA}$. Взаимодействия между атомами углерода и молекулами воды осуществлялось с помощью потенциала Леннарда-Джонса [5], где параметры взаимодействия определялись на основе правила смешивания Лоренца-Бертло. Периодические граничные условия были наложены только вдоль x и y направлений. Моделирование выполнялось в изотермически-изохорическом (NVT-) ансамбле при температуре $T=268\text{ K}$ и плотности 0.94 г/см^3 . Переохлажденная фаза воды при температуре $T=268\text{ K}$ была получена из высокотемпературного жидкого состояния, при $T=350\text{ K}$ минуя кристаллизацию. Скорость охлаждения составила $\gamma=10^{12}\text{ K/s}$. Для стабилизации температуры использовался термостат Нозе-Гувера с параметром релаксации 1.0 пс . Интегрирование уравнений движений было выполнено на основе алгоритма Верле в скоростной форме с временным шагом 2.0 фс . Внешнее однородное электрическое поле с

напряженностью $E=0.5 \text{ В/\text{Å}}$ было наложено вдоль бокового y -направления.

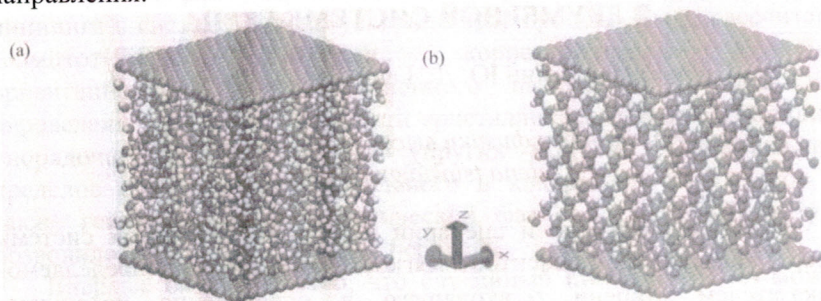


Рис. 1. Мгновенные конфигурации системы: (а) в начальный момент времени; (б) после наложения внешнего электрического поля.

В данной работе исследовано влияние внешнего электрического поля на гомогенное зародышеобразование льда в переохлажденной воде, заключенной между двумя слоями графена. Установлено, что однородное электрическое поле, приложенное перпендикулярно графеновым слоям не приводит к процессам структурного упорядочения, в то время как поле, направленное в боковом направлении приводит к кристаллизации переохлажденной воды в кубический лед Ice . На рис. 1 представлены мгновенные конфигурации системы при температуре $T=268 \text{ К}$ в отсутствии (левая колонка) и при наличии (правая колонка) внешнего электрического поля.

Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект 19-12-00022). Вычислительная часть работы, связанная с моделированием молекулярной динамики, выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (№18-02-00407-а).

Литература

1. J.L.F. Abascal, E. Sanz, R.G. Fernandez, C. Vega, J. Chem. Phys. **122**, 234511, **2005**.
2. C. Vega, J.L.F. Abascal, Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 19663, **2011**.
3. J.P. Ryckaert, G. Ciccotti, H.J.C. Berendsen, J. Comp. Phys. **23**, 327, **1977**.
4. G. Rajagopal, R.J. Needs, J. Comp. Phys. **115**, 399, **1994**.
5. M.C. Gordillo, J. Marti, J. Phys.: Condens. Matter. **22**, 284111, **2010**.
6. W. Drost-Hansen, J.L. Singleton, Fundamentals of Medical Cell Biology (JAI, Greenwich, CT, 1992).
7. M. Gavish, J.L. Wang, M. Eisenstein, M. Lahav, L. Leiserowitz, Science **256**, 815 (1992).