

UDC 533.9.004.14; 621.039.6

A.J. Tychengulova*, A.U. Aldiyarov, A.S. Drobyshev

Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

*E-mail: a.tychengulova@gmail.com

Molecular dynamics simulation of thermodynamic and transport properties of H-bonded low-temperature substances

The results of modeling of water clusters in nitrogen cryomatrix are presented. Earlier, our experimental studies of water in cryomatrix [1] have shown that changes in the concentration of an analyte in matrix leads to a splitting of the absorption bands characteristic frequencies of the molecules in the IR spectrum. Moreover the multiplicity of characteristic absorption bands in the IR spectrum remained unchanged during heating of the samples from the condensation temperature to the sublimation temperature of the matrix element.

Key words: molecular dynamics, hydrogen bond, cluster, matrix isolation.

А.Ж. Тыченгулова, А.У. Алдияров, А.С. Дробышев

Моделирование термодинамических и транспортных свойств водородосвязанных низкотемпературных веществ методом молекулярной динамики

В работе представлены результаты моделирования кластеров воды в криоматрице азота. В проведенных нами ранее экспериментах по изучению состояния воды в криоматрице было обнаружено влияние концентрации воды в матрице, приводящее к расщеплению полос поглощения характеристических частот молекул в ИК-спектре. Также в работе объясняется обнаруженная экспериментально стабильность образованных кластеров воды в матрице в процессе нагревания пленок вплоть до температуры испарения молекул матрицы. Обнаружено, что наиболее стабильным кластером молекул воды, образованным водородной связью, является пентамер.

Ключевые слова: молекулярная динамика, водородная связь, кластер, матричная изоляция.

А.Ж. Тыченгулова, А.У. Алдияров, А.С. Дробышев

Төмен температуралы сутекті байланысқан заттардың термодинамикалық және транспорттық қасиеттерін молекулалық динамика әдісі бойынша модельдеу

Жұмыста азот криоматрицасындағы судың кластерлерін модельдеу нәтижелері келтірілген. Біз бұрын жүргізген криоматрицадағы судың күйін зерттеу тәжірибелерінде ИК-спектрде молекулалардың сипаттамалық жиіліктерін жұтылу жолақтарының ыдырауына алып келетін матрицадағы судың концентрациясының әсері анықталды. Сонымен қатар, жұмыста матрицадағы судың қабықшаларды тіпті матрицаның булану температурасына дейін қыздыру кезінде түзілген тәжірибе жүзінде анықталған кластерлерінің тұрақтылығы түсіндіріледі. Сутекті байланыспен түзілген су молекуласының ең тұрақты кластері пентамер екені анықталды.

Түйін сөздер: молекулалық динамика, сутекті байланыс, кластер, матрицалық изоляция.

The results of modeling of water clusters in nitrogen cryomatrix are presented. Earlier, our experimental studies of water in cryomatrix [1] have shown that changes in the concentration of an analyte in matrix leads to a splitting of the absorption bands characteristic frequencies of

the molecules in the IR spectrum. Moreover the multiplicity of characteristic absorption bands in the IR spectrum remained unchanged during heating of the samples from the condensation temperature to the sublimation temperature of the matrix element. In order to find out what the structure of clusters is

responsible for the immutability of the absorption bands in the vibrational spectrum during thermal cycling of the samples computer research of water molecules enclosed in nitrogen cryomatrix by the molecular dynamics simulation was conducted.

For this purpose, theoretical studies were carried out using computer software packages of HyperChem 8.1, that implement used by us

semi empirical and ab initio molecular dynamics methods [2]. As a result of the research, the data must be obtained are of theoretical interest for summarizing the physico-chemical properties of systems, consisting of water molecules, and their combination with inert gases, as well as other atoms for studying the properties of molecular crystals composed of small molecules [3].

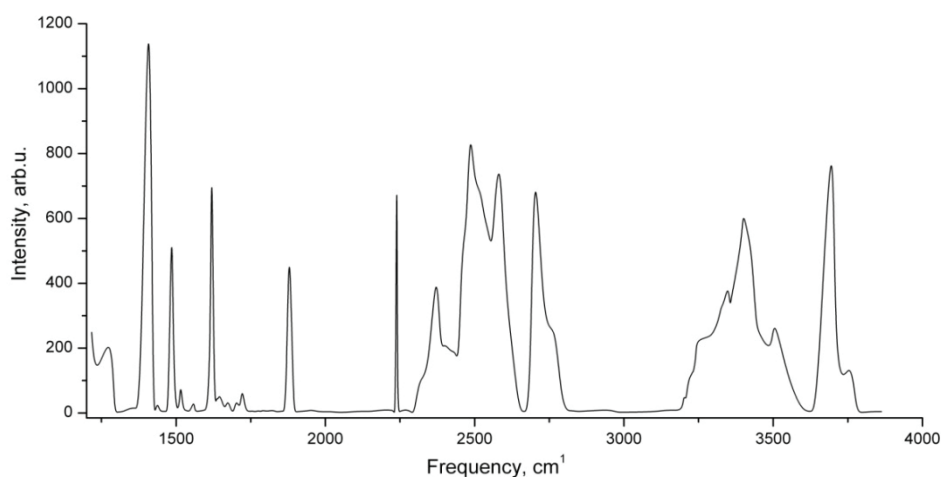


Figure 1 – Linear vibrational absorption spectrum of ice formed by 20 molecules at 16 K calculated in HyperChem using the PM3 method. Three intramolecular modes are preserved in ice, the bending vibration and the overlapped symmetric and asymmetric stretching vibrations and one intermolecular mode (librations).

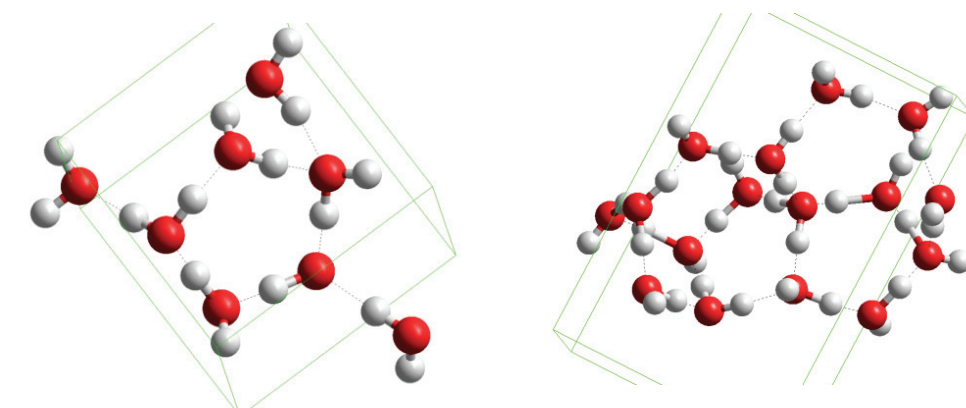


Figure 2 – Water pentamers

Calculations also showed that due to the ability of water molecules to form hydrogen bonds this system has a great variety of structures with substantially different binding energy and heat

capacity. Most stable ring structures among them is pentamer ring structure shown in Figure 2, which has only one proton molecules involved in the formation of hydrogen bonds.

References

- 1 S.Maheshwary, N. Patel, N.Sathyamurthy. J.Phys.Chem. A 2001, 105, 10525 – 10537.
- 2 A.Tokmachev, A.Tchougreeff, J.Phys.Chem.A 2005, 109, 7613-7620.
- 3 M. Matsumoto, S. Saito, I. Ohmine. Nature 2002, 416, 409 – 413.