

Молекулярно-динамическое моделирование поведения воды в условиях ограниченной геометрии кремниевых нанопор*

Е.Г. Одинцова^{1,3}, Д.Л. Гурина^{1,3}, Ю.А. Будков^{1,2,3}

Лаборатория вычислительной физики НИУ ВШЭ¹,
Департамент прикладной математики НИУ ВШЭ²,

НИО «Мультимасштабное моделирование молекулярных жидкостей и растворов»
Института химии растворов им. Г.А. Крестова РАН³

Понимание влияния межфазных эффектов на перенос жидкости через нанопоры имеет огромное значение для различных областей науки и техники, таких как проектирование нанофлюидных устройств, процессы адсорбции и разделения, а также прогнозирование и управление переносом жидкости. Одним из ключевых аспектов является изучение структурных и транспортных свойств воды в нанопорах, что стало возможным благодаря использованию методов компьютерного моделирования.

Целью данного исследования является анализ влияния ширины щелевидных кремниевых пор и функционализации их поверхности на структуру и динамику воды в условиях ограниченного пространства. С использованием метода полноатомного молекулярно-динамического моделирования исследовано поведение воды в кремниевых порах шириной 0.6–3.0 нм с негидроксидированной и полностью гидроксидированной поверхностью. Моделирование выполнено для поверхностей β -квистобалита (111), воспроизводящих свойства аморфного кремнезема с характерными силанольными группами (Si-OH и Si-(OH)₂).

Моделирование проводилось с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютера sCHARISMA НИУ ВШЭ в программном пакете Gromacs 2022.2. Использование гибридного параллелизма (MPI + CUDA) для эффективного распределения вычислений между CPU и GPU, позволило ускорить расчеты в десятки раз по сравнению с чисто CPU-реализацией. Такой подход открывает новые возможности для моделирования жидкостей в нанопорах, позволяя проводить расчеты с ранее недоступной точностью и скоростью. Молекулы воды описывались моделью SPC/E. Моделирование исследуемых систем выполнялось при температуре 298 К в NVT-ансамбле (термостат Нозе-Гувера, $\tau = 0.1$ пс) с периодическими граничными условиями во всех трех направлениях.

Для исследования структурных и динамических свойств воды в нанопорах были проведены расчеты распределения плотности, функций радиального распределения, среднего числа и времени жизни водородных связей, ориентационной упорядоченности молекул воды (угол между вектором дипольного момента и осью Z, перпендикулярной стенкам поры), транспортных характеристик (среднеквадратичные смещения в параллельном и перпендикулярном направлениях относительно поверхности поры).

В гидроксидированных порах шириной 0.6–1.0 нм вода формирует высокоупорядоченные слои с аномально высокой локальной плотностью (до 1.5 г/см³). При этом подвижность молекул вдоль поверхности значительно выше, чем в негидроксидированных порах. С увеличением ширины пор (1.5–3.0 нм) в гидроксидированных системах сохраняется четко выраженное слоистое распределение плотности, тогда как в негидроксидированных порах плотность изменяется плавно. Гидроксидирование поверхности приводит к улучшению смачиваемости за счет образования прочных водородных связей между молекулами воды и поверхностными силанольными группами, а также к формированию упорядоченных водных слоев с аномальными транспортными свойствами (в отличие от хаотичной адсорбции в негидроксидированных порах). Кроме того, наблюдается усиление анизотропии диффузии: молекулы воды демонстрируют более высокую подвижность вдоль поверхности поры.

Таким образом, гидроксидирование может являться одним из инструментов для управления структурой и динамикой воды в наноразмерных порах, что имеет важное значение для современных нанотехнологий и материаловедения.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 24-11-00096).