

doi:

Н.О. АТАМАСЬ, Л.А. БУЛАВІН, В.І. КОВАЛЬЧУК, О.М. МАЙКО

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка, фізичний факультет  
( Просп. Акад. Глушкова, 2/1, Київ 03127)

## ВПЛИВ РАДІАЦІЙНОГО ОПРОМІНЕННЯ НА ЛОКАЛЬНУ СТРУКТУРУ ВОДНОГО РОЗЧИНУ NaCl

УДК 539.2, 541.132

---

*З використанням методу молекулярної динаміки досліджено вплив радіаційного опромінення на локальну структуру водного розчину NaCl із концентрацією 0,14 м.д. при  $T = 300$  K в інтервалі енергій опромінення  $E_r = 0-12$  MeV. Встановлено, що при величинах  $E_r$ , менших або більших за 9 MeV, не відбувається кардинальної зміни локальної структури дослідженої системи. При  $E_r = 9$  MeV відбувається суттєва зміна локальної структури розчину і дія радіаційного опромінення може вважатись максимальною, що пояснюється збільшенням ймовірності взаємодії катіонів та аніонів розчиненої речовини між собою та їх взаємодією з молекулами води.*

*Ключові слова:* метод молекулярної динаміки, радіаційне опромінення, радіальна функція розподілу.

### 1. Вступ

Встановлення кількісних зв'язків між макроскопічними властивостями водних розчинів під впливом зовнішніх чинників і характером міжмолекулярних взаємодій сприяє вирішенню багатьох фундаментальних і практичних, зокрема медико-біологічних, проблем. Для вивчення змін фізичних властивостей розчину, що викликані зовнішніми факторами, найбільш часто використовують нейтронні, оптичні, діелектричні та інші методи дослідження, які безпосередньо надають інформацію про молекулярно-кінетичні рухи молекул. Це є основою для створення моделей структури води та водних розчинів [1].

Одним із найменш досліджених зовнішніх чинників, які суттєво впливають на властивості водних розчинів солей електролітів, є радіаційне опромінення. Зазначимо, що дослідження впливу відносно малих доз радіаційного опромінення, а

саме  $\beta$ -,  $\gamma$ - та рентгенівського опромінення у інтервалі енергій 5–12 MeV на водні розчини електролітів набуває в останній час особливої актуальності внаслідок їх інтенсивного використання у радіаційній онкології [2, 3]. Необхідно зазначити, що проведення відповідних експериментальних досліджень напштовхується на значні труднощі. Насамперед, це пов'язане з тим, що в результаті таких досліджень, як правило, отримують усереднені макрохарактеристики термодинамічної системи (густина, в'язкість, діелектрична проникність тощо). До того ж, інтерпретація одержаних результатів ускладнюється інтегральним впливом аніонів різної природи, що викликає зміну в організації молекул води внаслідок дії радіаційного опромінення. Іншими словами, результати експериментальних досліджень не дозволяють виконувати на мікрорівні детальний аналіз впливу радіаційного опромінення на структурні, енергетичні та динамічні властивості досліджуваних систем. Тому для вивчення мікроструктури іонних розчинів у таких задачах звичайно використовують метод мо-

© Н.О. АТАМАСЬ, Л.А. БУЛАВІН, В.І. КОВАЛЬЧУК,  
О.М. МАЙКО, 2015

лекулярного моделювання (МД), що й було реалізовано в даній роботі для аналізу мікроструктури в умовах радіаційного опромінення модельної системи розчину “вода–NaCl” із концентрацією  $x = 0,14$  м.д., який широко використовується в медицині [4].

## 2. Модель

Міжмолекулярна взаємодія в досліджуваній рідинній модельній системі описувалась за допомогою атом-атомного потенціалу, який є сумою ван-дер-ваальсівської і кулонівської складових [5]:

$$U = U_{LJ} + U_C = \sum_{ij} 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}}, \quad (1)$$

де  $\sigma_{ij}$ ,  $\epsilon_{ij}$  – параметри леннард-джонсівського потенціалу,  $r_{ij}$  – відстань між взаємодіючими частинками,  $q_i$  – заряд  $i$ -ї частинки. Значення параметрів для атомів молекули води та іонів наведені в табл. 1.

При виконанні розрахунків молекули води та іони були представлені як леннард-джонсові частинки, взаємодія між якими описувалась за допомогою OPLS-потенціалів [6]. Взаємодія молекул води між собою задавалась SPC/E моделлю [7]. Параметри взаємодії між нетотожними частинками визначались за допомогою комбінаційного правила [5]:

$$\sigma_{ij} = (\sigma_i + \sigma_j)/2, \quad \epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}, \quad (2)$$

де індекси  $i$  та  $j$  відповідають частинкам  $i$ -го та  $j$ -го сортів, а індекс  $ij$  відноситься до нетотожних частинок.

Вплив опромінення на локальну структуру і енергетичні властивості рідинної системи “вода–NaCl” був досліджений методом МД із використанням програмного пакета DL POLY 4.05 [8] з часовим кроком 2 фс. Моделювання виконувалося в *NVT*-ансамблі кубічної комірки з періодичними граничними умовами та 256 взаємодіючими частинками при  $T = 300$  К. Об’єм елементарної комірки розраховувався відповідно до експериментальних значень густини розчину при тій самій температурі. Далекодійча електростатична взаємодія враховувалась шляхом підсумовування за

методом Евальда [9]. Стабілізація досліджуваної системи в *NVT* здійснювалась за допомогою термостата Берензена [10]. При проведенні розрахунків іони і молекули води моделювалися як тверді, заряджені модельні частинки з фіксованою геометрією. Міжмолекулярні параметри одержувались на основі атом-атомного уявлення про взаємодію між атомами різних сортів.

Алгоритм моделювання полягав у такому: стабілізація системи досягалась протягом  $8 \cdot 10^5$  кроків розрахунків. Після чого на один із іонів системи діяло опромінення зі значенням енергії у інтервалі 0–12 МеВ, яка розподілялась рівномірно за усіма вісями координат. Потім система знову приходила у стан рівноваги впродовж  $10^6$  кроків. Після чого проводилось декілька серій незалежних розрахунків з часовими кроками 200 фс, 160 фс і 80 фс для одержання енергетичних характеристик досліджуваної системи. Усі радіальні функції розподілу (РФР) отримувались з кроком 200 фс.

У результаті моделювання одержувались й аналізувались дані щодо локальної структури рідинної системи та її енергетичних і динамічних властивостей. Відзначимо, що інформація щодо локальної структури досліджуваної системи може бути отримана як експериментально (рентгенографічним та нейтронним методами), так і теоретично. В останньому випадку розраховуються радіальні функції розподілу  $G_{XY}(R)$ , які характеризують ймовірність знаходження частинок сорту “ $y$ ”, навколо частинок сорту “ $x$ ”:

$$G_{XY}(R) = \frac{\langle N_y(R, R + dR) \rangle}{\rho_y 4\pi R^2 dR}. \quad (3)$$

У рівнянні (3) чисельник дорівнює середньому числу частинок сорту “ $y$ ” в сферичному шарі  $(R, R + dR)$ , а знаменник нормалізує розподіл таким чином [5], щоб  $G_{XY}(R) = 1$  при  $N_y$  і збігається з

Таблиця 1. Величини зарядів, параметрів потенціалу Леннарда-Джонса та мас для атомів молекул води, іонів  $\text{Na}^+$  і  $\text{Cl}^-$  [6]

Атом	$q(e)$	$\sigma, \text{Å}$	$\epsilon, \text{кДж/Моль}$	$M, \text{г/Моль}$
H	0,4238	0	0	1
O	-0,8436	3,169	0,6502	15,99
$\text{Na}^+$	+1	2,35	0,1	22,9898
$\text{Cl}^-$	-1	4,4	0,1	35,453

значенням густини  $\rho_y$ . Перша гідратаційна сфера визначається як простір, обмежений сферою з радіусом, чисельно рівним положенню першого мінімуму РФР. Друга гідратаційна оболонка визначається як простір сферичного шару між першим і другим мінімумами РФР.

Детальна інформація про локальну структуру і властивості водних розчинів електролітів може бути одержана шляхом аналізу енергетичних властивостей досліджуваних систем, РФР та значень числа найближчих сусідів  $Nz$ , яке пропорційне площі під першим піком функції розподілу густини і визначається виразом

$$Nz = \int_0^{z_{\min}} 4\pi\rho_0 g_2(r)r^2 dr, \quad (4)$$

де  $\rho_0$  – чисельна густина системи.

Аналіз сітки водневих зв'язків між взаємодіючими частинками виконувався з використанням такого критерію: встановлення водневого зв'язку можливе на відстані між найближчими сусідніми атомами кисню молекул води, яка не перевищує 3,5 Å. Водневий зв'язок між найближчими сусідами вибирався таким, щоб відстань між атомами О і Н була мінімальною з усіх можливих міжмолекулярних відстаней. Кут водневого зв'язку, який визначався як кут між векторами зв'язків О–Н сусідніх молекул води, набуває значення в діапазоні від 130° до 180° [11].

### 3. Аналіз отриманих результатів

#### 3.1. Енергія міжмолекулярної взаємодії

В табл. 2 наведені одержані залежності значень сумарної середньої енергії атом-атомних взаємодій  $\langle E_{\Sigma} \rangle$  та її кулонівської складової  $\langle E_C \rangle$  від енергії радіаційного опромінення  $E_r$  для дослідженого розчину.

Таблиця 2. Залежність величин  $\langle E_{\Sigma} \rangle$ ,  $\langle E_C \rangle$  від енергії радіаційного опромінення  $E_r$ .

Середні енергії	Енергія опромінення $E_r$ , MeV			
	0	6	9	12
$\langle E_{\Sigma} \rangle$ , ккал/моль	-7,71	-7,81	-7,82	-7,91
$\langle E_C \rangle$ , ккал/моль	-9,10	-9,03	-9,06	-8,91

Грунтуючись на аналізі даних, що наведені у табл. 2, можна констатувати, що збільшення енергії опромінення призводить до незначних змін складових сумарної енергії міжмолекулярної взаємодії за рахунок зменшення значень леннард-дженсової та збільшення кулонівської складової до загальної енергії міжмолекулярної взаємодії у розчині. Найбільших змін зазнає леннард-дженсова складова, що вказує на зменшення ролі близькодіючих взаємодій у системі із збільшенням енергії радіаційного опромінювання. Це може вказувати на те, що при збільшенні значень енергії опромінення має місце перебудова локальної структури рідини та зміна рухливості її компонент. Отримані залежності енергетичних характеристик дослідженого водного розчину NaCl від енергії опромінення також дають можливість припустити, що за рахунок зменшення ролі близькодіючих ван-дер-ваальсівських взаємодій та збільшення ролі кулонівської взаємодії у системі “вода–NaCl” відбувається зміна характеристик кластерів, утворених іонами і молекулами води, що, у свою чергу, впливає на динамічні властивості системи.

#### 3.2. Локальна структура водного розчину

Для підтвердження припущень про зміну локальної структури досліджуваного водного розчину NaCl під дією опромінення були визначені та проаналізовані РФР, які характеризують густину розподілу ймовірності для різних класів міжчастинкових взаємодій і дозволяють визначити взаємодії, що є найбільш чутливими до впливу радіаційного опромінення. При цьому особлива увага приділялася атом-атомним взаємодіям, які суттєво впливають на процеси формування локальної структури води в області аніонів і катіонів, а саме, взаємодіям  $\text{Na}^+ \dots \text{O}^{\text{W}}$ ,  $\text{Na}^+ \dots \text{H}^{\text{W}}$ ,  $\text{Cl}^- \dots \text{O}^{\text{W}}$ ,  $\text{Cl}^- \dots \text{H}^{\text{W}}$  та взаємодіям між молекулами води.

Насамперед розглянемо і проаналізуємо РФР, які описують густину ймовірності перебування молекул води одна відносно одної (рис. 1). Положення першого максимуму РФР  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{O}^{\text{W}}}(R)$  відповідає відстані між молекулами води. На рисунку видно, що під впливом опромінення відстань між взаємодіючими молекулами води не змінюється. Також не змінюється і довжина водневих зв'язків між молекулами води, про що свідчить незмінність положень першого та другого максимумів

РФР  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{H}^{\text{W}}}(R)$ . Стабільність положень першого та другого мінімумів функцій  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{O}^{\text{W}}}(R)$  та  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{H}^{\text{W}}}(R)$  вказує на незалежність розмірів першої і другої гідратаційних оболонок від енергії радіаційного опромінення. Отримані дані дозволяють стверджувати, що опромінення не призводить до зміни характеристик асоціатів, які утворені молекулами води.

Щоб дослідити вплив радіаційного опромінення на взаємодію іонів  $\text{Na}^+$  з молекулами води, проаналізуємо поведінку РФР  $G^{\text{Na}^+-\text{O}^{\text{W}}}(R)$  і  $G^{\text{Na}^+-\text{H}^{\text{W}}}(R)$ , перші максимуми яких зафіксовано на відстанях 3,3 Å та 3,1 Å відповідно (рис. 2).

З рис. 2 видно, що значення РФР зменшуються зі збільшенням енергії радіаційного опромінення. В обох випадках незмінними залишаються положення та значення першого і другого мінімумів РФР, що свідчить про незалежність розмірів першої та другої гідратаційних оболонок від енергії радіаційного опромінення. У випадку аналізу взаємодій  $\text{Cl}^- \dots \text{O}^{\text{W}}$  та  $\text{Cl}^- \dots \text{H}^{\text{W}}$  особливу увагу привертає РФР  $G^{\text{Cl}^--\text{H}^{\text{W}}}(R)$ , перший максимум якої знаходиться на відстані 2,2 Å (рис. 3).

Значення РФР  $G^{\text{Cl}^--\text{O}^{\text{W}}}(R)$  і  $G^{\text{Cl}^--\text{H}^{\text{W}}}(R)$  зменшуються зі збільшенням енергії радіаційного опромінення до 9 МеВ. Енергія опромінення 9 МеВ призводить до істотного аномального збільшення значень максимумів РФР, яке перевищує похибку їх визначення, що свідчить про збільшення ймовірності цього класу взаємодій.

Аналіз РФР  $G^{\text{Na}^+-\text{Cl}^-}(R)$  (рис. 4) показує, що збільшення енергії опромінення є причиною зменшення значень РФР та не впливає на положення першого максимуму, яке визначає відстань між взаємодіючими частинками. Аномальна поведінка значень РФР  $G^{\text{Na}^+-\text{Cl}^-}(R)$  спостерігається при енергії опромінення 9 МеВ. З поведінки залежностей  $G^{\text{Cl}^--\text{Cl}^-}(R)$ , наведених на цьому самому рисунку, випливає, що збільшення енергії опромінення до 9 МеВ призводить до аномального збільшення положень максимуму РФР і зменшення значень першого мінімуму, що свідчить про більшу впорядкованість локальної структури досліджуваної системи при такому значенні енергії опромінення. У разі взаємодії іонів  $\text{Na}^+$  між собою збільшення величин РФР  $G^{\text{Na}^+-\text{Na}^+}(R)$  також фіксується при енергії опромінення 9 МеВ, за якої більш чітко, ніж за інших енергій, визначається перша гі-

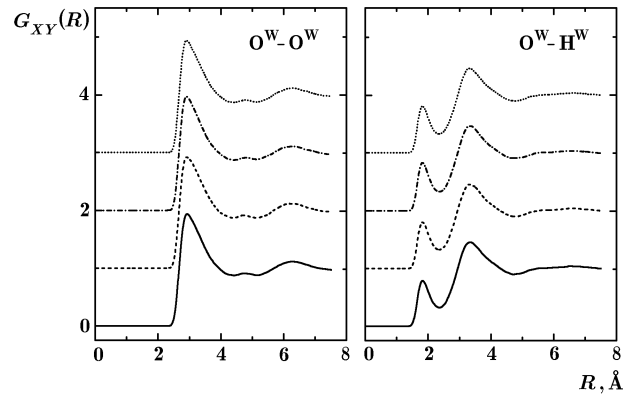


Рис. 1. Радіальні функції розподілу  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{O}^{\text{W}}}(R)$  та  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{H}^{\text{W}}}(R)$  рідинної системи "вода- $\text{NaCl}$ " ( $x = 0,14$  м.д.,  $T = 300$  К) при енергіях опромінення, МеВ: 0 – суцільні криві, 4 – штрихові, 9 – штрихпунктирні, 12 – точкові

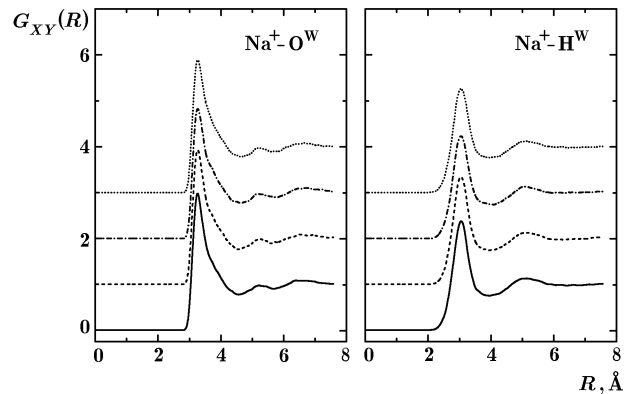


Рис. 2. Те саме, що й на рис. 1, але для густини ймовірності знаходження атомів молекул води відносно іонів  $\text{Na}^+$

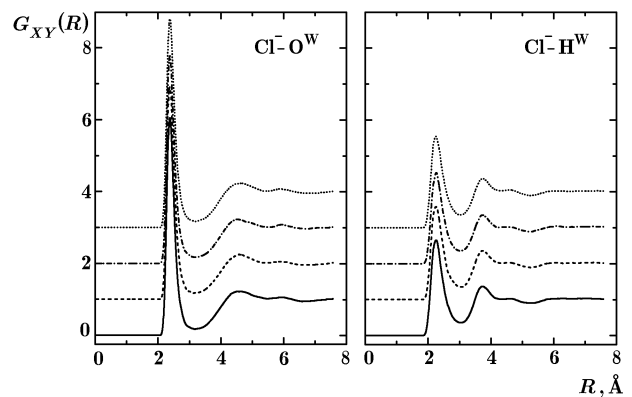


Рис. 3. Те саме, що й на рис. 1, але для густини ймовірності знаходження атомів молекул води відносно іонів  $\text{Cl}^-$

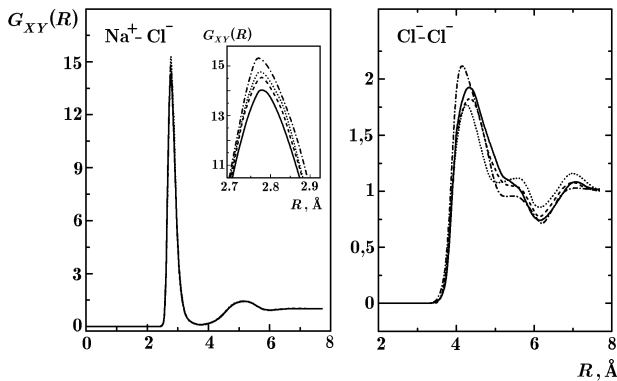


Рис. 4. Те саме, що й на рис. 1, але для густин ймовірності знаходження іонів  $\text{Na}^+$  і  $\text{Cl}^-$  відносно іона  $\text{Cl}^-$

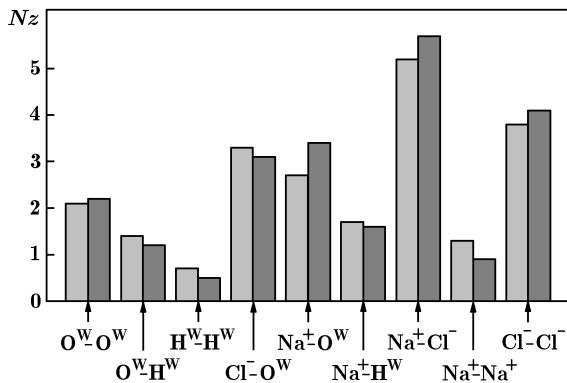


Рис. 5. Залежність числа найближчих сусідів  $Nz$  дослідженого розчину від енергії радіаційного опромінення: сірий колір – 0, 6, 12 MeV, темно-сірий – 9 MeV

Таблиця 3. Величини коефіцієнта самодифузії  $D (\cdot 10^{-9} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1})$  для молекул води, іонів  $\text{Na}^+$  та  $\text{Cl}^-$  у дослідженому розчині при різних значеннях енергії опромінення

Об'єкт	Енергія опромінення $E_r$ , MeV			
	0	6	9	12
$\text{H}_2\text{O}$	2,11	2,22	2,20	2,07
$\text{Na}^+$	0,66	0,52	0,35	0,42
$\text{Cl}^-$	0,58	0,51	0,55	0,56

дратаційна оболонка, що свідчить про більшу впорядкованість локальної структури досліджуваної системи. Тобто, енергія радіаційного опромінення 9 MeV є такою, при досягненні якої збільшується ймовірність взаємодії іонів між собою, на що вказує аномальна поведінка значень відповідних РФР.

### 3.3. Число найближчих сусідів

Аналіз впливу радіаційного опромінення на процеси формування локальної структури водного розчину  $\text{NaCl}$  не може бути повним без аналізу середньої кількості найближчих сусідів  $Nz$ , залежність якої від енергії радіаційного опромінення наведена на рис. 5.

Аналіз РФР  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{H}^{\text{W}}}(R)$ ,  $G^{\text{H}^{\text{W}}-\text{H}^{\text{W}}}(R)$  та  $G^{\text{O}^{\text{W}}-\text{O}^{\text{W}}}(R)$  у межах першої гідратаційної сфери дозволив встановити, що молекули води за енергій радіаційного опромінення, менших ніж 9 MeV, утворюють асоціати з  $Nz = (4,1-0,3)$  молекул. За енергій радіаційного опромінення, більших ніж 9 MeV, збільшення числа найближчих сусідів не перевищує похибку визначення  $Nz$ . Одержаний результат вказує на те, що під дією радіаційного опромінення у розглянутому діапазоні енергій не відбувається зміни структури водних асоціатів. Аналіз значень  $Nz$ , які характеризують процеси взаємодії іонів між собою та іонів з молекулами води, показує, що за енергій радіаційного опромінення 9 MeV збільшення кількості найближчих сусідів перевищує похибку їх визначення.

З подальшого аналізу одержаних результатів (рис. 5) випливає, що за енергій радіаційного опромінення, менших або більших за 9 MeV, за рахунок взаємодії молекул води між собою утворюються асоціати з чотирьох молекул, причому в околі іона  $\text{Na}^+$  знаходиться  $Nz = (4,2-0,3)$ , а в околі іона  $\text{Cl}^-$  –  $Nz = (4,1-0,3)$  молекул води. У цьому випадку в досліджуваній системі утворюються асоціати із взаємодіючих іонів та катіонів, що складаються з  $Nz = (5,1-0,3)$  іонних пар. За енергій радіаційного опромінення 9 MeV кількість іонних пар збільшується до  $Nz = (5,7-0,3)$ , а число молекул води, які оточують іон  $\text{Na}^+$ , зменшується:  $Nz = (3,4-0,3)$ . Усі інші зміни числа найближчих сусідів знаходяться у межах похибки розрахунків.

### 3.4. Коефіцієнт самодифузії

Коефіцієнт самодифузії іонів і молекул води розраховувався шляхом інтегрування часової автокореляційної функції:

$$D = \frac{1}{3} \int \langle V(t)V(0) \rangle dt. \quad (5)$$

У табл. 3 наведені одержані величини коефіцієнта самодифузії молекул води та іонів при різних енергіях опромінення дослідженого розчину.

Отримані в результаті проведених розрахунків значення  $D^{\text{H}_2\text{O}}$  корелюють з даними для води, які одержані експериментально з використанням методу квазіпружного розсіяння повільних нейтронів [12]. З аналізу даних, наведених у табл. 3, випливає, що при збільшенні величини енергії опромінення з 0 до 6 МеВ значення коефіцієнтів самодифузії  $D^{\text{H}_2\text{O}}$  дещо збільшуються, значення  $D^{\text{Cl}^-}$  – залишаються майже незмінними, а значення  $D^{\text{Na}^+}$  – зменшуються. При енергіях радіаційного опромінення, менших за 9 МеВ, перебудова локальної структури розчину в околі іонів відбувається більш повільно, ніж в околі катіонів, що пов'язано із суттєвою різницею мас цих аніонів та їх стоксових радіусів (для катіона  $\text{Na}^+$  стоксовий радіус дорівнює 1,88 Å, для  $\text{Cl}^-$  – 1,33 Å). Збільшення енергії опромінення з 6 до 9 МеВ призводить до незначного зменшення значень коефіцієнта самодифузії води. При цьому збільшується рухливість іонів, а рухливість катіонів суттєво зменшується. Зменшення значень  $D^{\text{Na}^+}$  свідчить про те, що за цієї енергії опромінення майже всі катіони брали участь в утворенні асоціатів з іншими компонентами розчину. Подальше збільшення енергії опромінення до 12 МеВ призводить до збільшення  $D^{\text{Na}^+}$ , яке залишається значно меншим, ніж  $D^{\text{Cl}^-}$ . Тобто, за енергій, менших, ніж 9 МеВ, рухливість молекул води в системі не змінюється. Подальше збільшення енергії опромінення призводить до зменшення значень  $D^{\text{H}_2\text{O}}$ , що вказує на ускладнення вільного руху молекул води. Отримані дані підтверджують припущення про відмінність механізмів взаємодії між молекулами води та іонами при досліджених енергіях опромінення.

#### 4. Висновки

Проведені дослідження впливу радіаційного опромінення на локальну структуру водного розчину  $\text{NaCl}$  із концентрацією 0,14 м.д. при  $T = 300$  К з використанням методу молекулярної динаміки показали, що будова кластерів, утворених молекулами води, не залежить від енергії радіаційного опромінення. При енергіях радіаційного опромінення, менших або більших за 9 МеВ, не відбувається кардинальної зміни локальної структури дослідженої системи. При енергії радіаційного опромінення, яка становить 9 МеВ, відбувається зміна локальної структури досліджуваного розчину за

рахунок збільшення ймовірності взаємодії катіонів та аніонів між собою та їх взаємодії з молекулами води, що приводить до більшої впорядкованості локальної структури розчину. Зміна енергії опромінення впливає на динамічні характеристики системи, які є найбільш суттєвими за енергії опромінення 9 МеВ. Внаслідок цього дія радіаційного опромінення на досліджувану систему за енергії 9 МеВ може вважатись максимальною.

1. A. Wallqvist and R.D. Mountain, Rev. Comp. Chem. **13**, 183 (1999).
2. D. Schulz-Ertner, O. Jäkel, and W. Schlegel, Semin. Rad. Onc. **16**, 249 (2006).
3. G. Kraft, Progr. Part. Nucl. Phys. **45**, 476 (2000).
4. М.Д. Машковський, *Лекарственные средства* (Новая Волна, Москва, 2005).
5. M.P. Allen and D.Y. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford, 2010).
6. P.B. Balbuena, K.P. Johnston, and P.J. Rossky, J. Phys. Chem. **100**, 2706 (1996).
7. K. Toukan and A. Rahman, Phys. Rev. B **31**, 2643 (1985).
8. T.R. Forester, *The DL POLY 2.0. User Manual* (Daresbury Laboratory, UK, 2013).
9. T. Schlick, *Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide* (Springer, New York, 2002).
10. H.J.C. Berendsen, J.R. Grigera, and T.P. Straatsma, J. Phys. Chem. **91**, 6269 (1987).
11. M. Branka, B.M. Ladanyi, and M. Maroncelli, J. Chem. Phys. **109**, 3204 (1998).
12. Л.А. Булавин, Т.В. Кармазина, В.В. Клепко, *Нейтронная спектроскопия конденсированных сред* (Академперриодика, Киев, 2005).

Одержано 22.10.14

Н. А. Атамась, Л. А. Булавин,  
В. И. Ковальчук, А. М. Майко

#### ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА ЛОКАЛЬНУЮ СТРУКТУРУ ВОДНОГО РАСТВОРА $\text{NaCl}$

##### Резюме

С использованием метода молекулярной динамики исследовано влияние радиационного облучения на локальную структуру водного раствора  $\text{NaCl}$  с концентрацией 0,14 м.д. при  $T = 300$  К в интервале энергий облучения  $E_r = 0-12$  МэВ. Установлено, что при величинах  $E_r$ , меньших или больших 9 МэВ, не происходит кардинального изменения локальной структуры исследуемой системы. При  $E_r = 9$  МэВ имеет место существенное изменение локальной структуры раствора и действие радиационного облучения может считаться максимальным, что объясняется увеличением вероятности взаимодействия катионов и анионов растворенного вещества между собой и их взаимодействием с молекулами воды.

*N.A. Atamas, L.A. Bulavin,  
V.I. Kovalchuk, A.M. Mayko*

INFLUENCE OF RADIATION ON THE LOCAL  
STRUCTURE IN A NaCl AQUEOUS SOLUTION

Резюме

Using the method of molecular dynamics, the influence of radiation within the energy interval  $E_r = 0 \div 12$  MeV on the

local structure in a 0.14-mol.% NaCl aqueous solution at the temperature  $T = 300$  K is studied. No substantial changes in the local structure of the solution were found at energies  $E_r$  higher or lower than 9 MeV. At  $E_r = 9$  MeV, the local structure changes drastically. This radiation effect can be considered as a maximum one and taking place due to the increase of the probability for cations and anions of the solute to interact with one another and with water molecules.