

## **ВОДНЫЕ КЛАСТЕРЫ: СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ**

*А.В. Карговский*

Выполнен численный расчет структур и колебательных спектров инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния малых структурных фрагментов воды на основе решения молекулярного уравнения Шредингера методом X3LYP в базисе aug-cc-pVQZ. Обсуждаются спектральные особенности и эволюция свойств водородных связей в кластерах с увеличением размера. Полученные результаты могут быть использованы для расчетов воды методом молекулярной динамики.

## **WATER CLUSTERS: STRUCTURES AND OPTICAL VIBRATIONAL SPECTRA**

*A.V. Kargovsky*

Numerical calculations of structures, Infrared and Raman vibrational spectra of small water clusters are performed by solution of the molecular Schrödinger equation in the X3LYP/aug-cc-pVQZ theory. Spectral features and evolution of hydrogen bond properties in clusters with their size growth are discussed. Obtained results may be used in molecular dynamics simulations of water.