

Российские физики упростили моделирование молекул в сильных электрических полях

В Центре научной коммуникации МФТИ сообщили, что физики разработали математический подход, позволяющий точнее предсказывать поведение сложных молекул в условиях мощных электрических полей. Результаты исследования могут помочь в создании лекарств, ускоряя анализ структуры соединений.

Работа профессора Олега Толстыхина и его коллеги Кирилла Базарова посвящена изучению туннельной ионизации — процесса, при котором электроны покидают молекулу под действием сильного поля. Ранее расчеты таких квантовых взаимодействий требовали больших вычислительных ресурсов. Российские физики предложили метод на основе функции Грина, который значительно сокращает время вычислений, сохраняя точность.

Используя новый подход, ученые смоделировали поведение электронов в молекулах воды, бензола и аминокислоты лейцина. В ходе расчетов обнаружились ранее неизученные эффекты, например, резкие изменения свойств молекулярных орбиталей при критической силе поля. Также выявлены аномалии в движении электронов, которые содержат информацию о геометрии молекул. Эти данные могут стать основой для новых методов анализа структуры веществ, отметили в Центре.

Особый интерес представляет обнаружение «вихревых электронов» — частиц со сложной траекторией, которые возникают при ионизации. По словам Толстыхина, это явление открывает путь к технологиям, способным различать зеркальные формы молекул. Такие изомеры часто имеют разную биологическую активность, что критично при создании безопасных лекарств.