

УДК 544.272+544.034.1

**ДИНАМИКА И ДИФФУЗИЯ АТОМОВ И РАДИКАЛОВ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ  
ПРИ УФ-ОБЛУЧЕНИИ ВОДНОГО ЛЬДА.  
МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ**© 2013 г. **Н.В. Свинков<sup>1</sup>, С.К. Игнатов<sup>1</sup>, М.Ю. Куликов<sup>2</sup>, А.Г. Разуваев<sup>1</sup>**<sup>1</sup> Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского<sup>2</sup> Институт прикладной физики РАН, Н. Новгород

n.v.svinkov@gmail.com

Поступила в редакцию 10.10.2012

Методом классической молекулярной динамики проведено исследование поведения молекул воды, атомов водорода и гидроксил-радикалов внутри кристаллического водного льда в интервале температур от 50 до 150 К. Определен характер движения частиц, рассчитаны коэффициенты диффузии и самодиффузии (для молекул воды) в указанном интервале температур.

*Ключевые слова:* водный лед, моделирование, классическая молекулярная динамика, процессы фотолиза, радикалы, диффузия.

**Введение**

Водный лед в кристаллическом и аморфном состояниях присутствует в больших количествах в верхних слоях атмосферы нашей планеты [1], а также межзвездном пространстве [2, 3]. Изучение воздействия ультрафиолетового излучения на водный лед имеет большое значение для химии атмосферного и межзвездного льда. Под воздействием жесткого космического УФ-излучения во льду интенсивно протекают процессы фотолиза, первичными продуктами которого являются атомы водорода и радикалы ОН. Скорость и механизм диффузии образовавшихся атомов и радикалов внутри льда и на его поверхности определяют вероятность процессов их дальнейшей рекомбинации, а также протекания реакций с другими атомами и молекулами. Установлено [4–7], что главным продуктом фотолиза, накапливающимся внутри льда, является пероксид водорода, однако его выход и скорость накопления зависят от температуры и состава внешней среды. При поглощении больших доз УФ-фотонов  $\alpha$ -серии Лаймана в интервале температур 35–100 К обнаружена фотодесорбция молекул воды [6, 7] и других продуктов, таких как  $H_2$  и  $O_2$  [6]. Десорбция радикалов может приводить к «испарению» льда под воздействием УФ-излучения и будет влиять на химический состав льда [8]. В целом механизмы химических и физических процессов, следующие за стадией поглощения УФ-излучения, изучены слабо. В частности, скорость и механизм диффузии атомов водорода и радикалов ОН после первичной фотодиссоциации молекулы воды, их динамика внутри твердого льда и кон-

станты скорости элементарных реакций с окружающими молекулами остаются неизвестными.

Процессам фотодиссоциации молекул воды посвящен ряд теоретических работ. Процессы десорбции и рекомбинации продуктов фотолиза кристаллического и аморфного водного льда исследованы Андерсоном с сотрудниками методом классической молекулярной динамики (МД) [8–10]. В работах представлены данные в интервале температур от 10 до 90 К о величинах свободного пробега атомов Н и радикалов ОН, вероятности рекомбинации фотофрагментов и фотодесорбции радикалов и молекул воды с поверхности ледяных частиц. Авторы указывают на большую подвижность и склонность к фотодесорбции атомов Н, чем ОН. В работе [11] представлены результаты МД исследования диффузии атома водорода внутри гексагонального льда при температуре 8 К, рассчитаны коэффициенты диффузии Н при данной температуре.

С практической точки зрения исследование процессов образования и перемещения продуктов фотолиза имеет важное значение для изучения баланса перекисных соединений в атмосфере, влияния на климат и атмосферной химии в целом. Однако большинство работ, связанных с моделированием диффузии фотофрагментов, посвящено низкотемпературной области (~10 К), что соответствует условиям космического пространства. Существует необходимость детального теоретического исследования динамики и диффузии фотофрагментов в области температур 10–250 К, при которых ледяные частицы существуют в различных слоях атмосферы Земли. Данная работа посвящена изучению особенностей диффузии продуктов фотолиза

водного льда методом молекулярной динамики в интервале температур 50–150 К.

### Методика моделирования

Твердая фаза воды, или водный лед, может существовать в различных кристаллических и аморфных разновидностях. При обычных (низких) давлениях стабильную кристаллическую разновидность льда называют льдом I. Он представляет собой совокупность двух кристаллических фаз – фазы *Ih* (обычный, или гексагональный, лед), обладающей гексагональной кристаллической решеткой, и фазы *Ic* (кубический лед), обладающей кубической решеткой. Лед *Ih*, или обычный лед, является наиболее распространенной формой льда на Земле. Параметры решетки вблизи точки плавления составляют  $a = 0.4532$  нм,  $c = 0.7367$  нм. Отношение  $c/a$  (1.628) очень близко к идеальному отношению гексагональной упаковки металлов и практически не зависит от температуры. Таким образом, решетка напоминает искаженную структуру графита.

Особенностью кристалла льда является подвижность структуры его поверхности. Поскольку водородные связи, соединяющие молекулы воды, имеют энергию около  $20$  кДж·моль<sup>-1</sup>, температурные колебания приводят к высоким амплитудам колебаний молекул в кристалле и, особенно, в приповерхностных слоях. Повышение температуры до  $260$  К приводит к практически полному деструктурированию поверхности и образованию так называемого квазижидкого слоя, в котором движение молекул уже не может описываться как колебательное движение вблизи кристаллических узлов, а скорее напоминает движение молекул в жидкости. При температурах ниже  $220$  К (по некоторым данным – ниже  $250$  К) квазижидкий слой перестает играть существенную роль, и поверхность льда может быть с хорошей степенью точности описана как поверхность молекулярного кристалла.

Для моделирования методом молекулярной динамики наиболее подходящими являются два типа моделей – модель изолированной частицы (молекулярного кластера) и модель с трехмерными периодическими условиями. Первый тип модели в большей степени отражает свойства наночастиц, в то время как частицы большего размера лучше описываются вторым типом моделей [12]. В связи с тем, что в наших исследованиях предполагается участие частиц большого размера (около  $1$  мкм и выше), для моделирования был выбран второй тип модели.

Моделирование атмосферных ледяных частиц проводилось с использованием системы на основе кристаллического гексагонального льда

*Ih*. Эта модификация характеризуется способностью к протонному разупорядочиванию, в результате на основе одной и той же кристаллической решетки атомов водорода возникает большое число ориентационных изомеров, различающихся ориентацией водородных связей. Для решения вопроса о выборе подходящего ориентационного изомера используются специальные «упорядоченные» модели, в которых при одной и той же структуре кристаллической подрешетки атомов кислорода выбираются одна или несколько упорядоченных (т.е. обладающих дальним порядком) подрешеток атомов водорода. Одной из таких систем является так называемый лед Пизани [13]. Более современные модели, основанные на оптимизации энергии среди различных ориентационных изомеров, были разработаны в работе Хирша [14]. В настоящее время эти структуры часто используются в теоретических исследованиях, обеспечивая простоту моделирования, структурную устойчивость и низкий поверхностный дипольный момент (свойство, важное для воспроизведения электрических свойств льда). В связи с этим, в данной работе в качестве модели была выбрана ромбическая низкотемпературная равновесная форма с упорядоченным расположением протонов, так называемый лед XI Хирша. По данным [14], лед XI обладает минимальной энергией среди других ориентационных изомеров (оценка методом DFT), а также имеет чередование терминальных ОН-групп и обеспечивает минимальный дипольный момент кристаллических слоев, что гарантирует отсутствие электрической поляризации всего кристалла.

В данной работе была использована модель кристалла, состоящая из  $10$  бислоев ( $1800$  молекул  $H_2O$ ). Эта структура была получена транслированием элементарной ячейки льда XI и представляла собой параллелепипед размерами  $40 \times 39 \times 36$  Å в  $x$ ,  $y$  и  $z$  направлениях соответственно. Параметры элементарной ячейки и координаты атомов были взяты из работы [14]. Ось  $z$  соответствует направлению нормали к бислою. Начало координат располагалось в центре системы, для создания пространственной структуры льда на модель были наложены трехмерные периодические условия. Плотность кристалла, соответствующего данной модели, составляет  $0.96$  г/см<sup>3</sup>.

Молекулы воды рассматривались как жесткие. Для описания взаимодействия молекул  $H_2O$  использовалась трехточечная модель воды SPC [15]. Размерные параметры молекул воды были скорректированы в соответствии с выбранной моделью. Для модели SPC длина связи О–Н составляет  $1.0$  Å, валентный угол –  $109.47^\circ$ . За-

ряды на атомах Н и О равны 0.41e и -0.82e соответственно [16]. Взаимодействие молекул H<sub>2</sub>O в рамках модели SPC описывалось О–О Леннард–Джонсовским взаимодействием.

Для исследования динамики диффузии частиц фотофрагментов на основе описанной модели льда были рассмотрены две системы. Первая модель была получена введением в модель льда 20 атомов Н, вторая – 20 радикалов ОН. Начальные координаты частиц внутри ячейки выбирались случайным образом. Ориентация ОН-радикалов выбиралась случайно в направлении координатных осей. Длина связи О–Н гидроксил-радикалов составляла 0.97 Å и была фиксирована в ходе расчета, заряды равны -0.4e и 0.4e для атомов О и Н соответственно. Описание взаимодействий Н и ОН с молекулами воды проводилось при помощи потенциальных функций, использованных ранее в работе [8].

Расчеты выполнялись с использованием программного пакета для молекулярно-динамических расчетов DL\_POLY [17]. Система представляла собой NVT-ансамбль с наложенными трехмерными периодическими условиями. Интегрирование уравнений движения проводилось при помощи алгоритма Leapfrog Verlet [12]. Поддержание постоянства длин связей осуществлялось при помощи алгоритма SHAKE [18]. Для расчета электростатических взаимодействий использовался метод суммирования по Эвальду [19]. Радиус действия неэлектростатических потенциалов составлял 10 Å. Для последующего анализа результатов динамики проводилась запись текущих координат и смещения от первоначального положения для всех частиц с периодичностью 50 шагов. Молекулярная система предварительно уравнивалась, как правило, на протяжении 40000 шагов. Для поддержания постоянства температуры использовался термостат Берендсена [20] с периодом релаксации 0.1 пс. При анализе результатов динамики период уравнивания не учитывался. Коэффициенты самодиффузии рассчитывались с помощью обобщенного уравнения Эйнштейна

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle r^2 \rangle}{6t}, \quad (1)$$

где  $D$  – коэффициент самодиффузии,  $\langle r^2 \rangle$  – средний квадрат смещения (MSD) частицы к моменту времени  $t$ . При расчете  $D$  значение смещения усреднялось по всем частицам данного типа.

## Результаты и обсуждение

Для проверки адекватности используемой модели водного льда был проведен расчет исходной системы (H<sub>2</sub>O)<sub>1800</sub> без радикальных частиц. Система уравнивалась в течение 10 пс, расчет МД проводился в течение 0.5 нс с шагом 0.25 фс. Расчеты проводились в температурном интервале 50–150 К. Полученные при наивысшей температуре (150 К) зависимости среднего квадрата смещения и коэффициента самодиффузии молекул воды от времени представлены на рис. 1.

Из представленных зависимостей видно, что при 150 К молекулы воды внутри ледяной структуры совершают колебательные движения около положения равновесия, коэффициент самодиффузии H<sub>2</sub>O стремится к нулю, плавления льда не происходит. Аналогичные результаты были получены при более низких температурах. Этот факт согласуется с результатами предыдущих исследований [21], в которых было показано, что при использовании модели SPC плавление льда происходит при температуре 190 К. Рассчитанные в интервале температур 50–150 К коэффициенты самодиффузии воды представлены в табл. 1.

Таблица 1

Коэффициенты самодиффузии молекул воды при различных температурах

Температура, К	$D \cdot 10^9, \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$
50	$4.4 \cdot 10^{-4}$
75	$5.3 \cdot 10^{-4}$
100	$6.2 \cdot 10^{-4}$
125	$8.2 \cdot 10^{-4}$
150	$1.0 \cdot 10^{-3}$

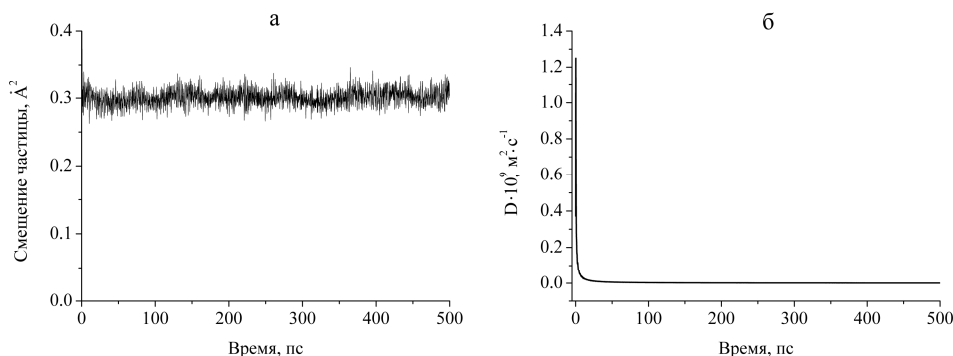


Рис. 1. Зависимость от времени среднего квадрата смещения (а) и коэффициента самодиффузии (б) молекул воды при 150 К

Полученные значения коэффициентов самодиффузии находятся в интервале  $(10^{-3}\div 10^{-4})\times 10^{-9}$  м<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>. В разработанной модели кристаллическая структура льда будет сохраняться, а диффузия водных молекул будет обусловлена их колебаниями около положения равновесия. Определенные экспериментально коэффициенты самодиффузии для молекул воды, приводимые в литературе, как правило, относятся к более высоким температурам. В [22] был экспериментально определен коэффициент самодиффузии воды при 273 К. Полученная величина ( $1.1\cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>·с<sup>-1</sup>) значительно выше, чем полученные нами значения при 50–150 К, что также подтверждает адекватность выбранной нами модели.

Для системы, содержащей 20 атомов Н, молекулярно-динамический расчет проводился в интервале 100 пс после уравнивания в течение 10 пс. Для оценки воспроизводимости расчеты проводились с шагом 0.5, 0.25 и 0.1 фс. Средний квадрат смещения атомов водорода за время расчета составлял 12.0, 7.1 и 7.0 Å соответственно. Поскольку уменьшение шага интегрирования ниже 0.25 фс не приводит к существенному изменению среднего смещения, дальнейшие расчеты проводились при этом значении данного параметра.

Молекулярно-динамическое исследование диффузии атомов Н и радикалов ОН проводилось после уравнивания в течение 10 пс, время расчета после уравнивания составляло 0.5 нс. Расчеты проводили в температурном интервале 50–150 К с шагом 25 К. Зависимости смещения частиц радикалов от времени при 150 К представлены на рис. 2а и 2б для Н и ОН соответственно. В процессе диффузии в системе, содержащей радикалы ОН, происходило небольшое разупорядочение кристаллического окружения, при моделировании диффузии атомов водорода разупорядочения практически не происходило.

Анализ полученных данных показывает, что движение частиц в кристалле складывается из низкоамплитудных осцилляций между бислоями водного льда и резких смещений (скачков), которые соответствуют периодическим перескокам через границу бислоя. Перескоки происходят в прямом и обратном направлениях, их разность дает число «эффективных» перескоков, обеспечивающих перемещение частиц внутри кристалла. Таким образом, диффузия Н и ОН представляет собой совокупность частых низкоамплитудных колебаний (медленного дрейфа) между бислоями и значительно более редких перескоков через бислой. Перескоки атомов водорода более выражены, чем радикалов ОН. В случае атомов Н основной вклад в диффузию вносят перескоки, для радикалов ОН влияние этих двух составляющих примерно одинаково. Температурная зависимость количества и частоты перескоков, а также частота эффективных перескоков представлены в табл. 2 и на рис. 3а и 3б.

С увеличением температуры частота перескоков возрастает. Характер температурной зависимости близок к экспоненциальному: для атомов Н в интервале 75–150 К график этой зависимости в полулогарифмических координатах представляет прямую с коэффициентом корреляции 0.942. Для ОН эта зависимость является линейной во всем интервале температур (с отклонением от прямой точки при 75 К), коэффициент корреляции 0.931. При температурах ниже 100 К перескоки водорода на протяжении всего расчета не были зарегистрированы. Для ОН перескоки регистрируются уже при 75 К, что, по-видимому, объясняется большей кинетической энергией ОН как более массивной частицы. Число эффективных перескоков в целом пропорционально общему числу перескоков и увеличивается при возрастании температуры, что особенно заметно для ОН.

Таблица 2

Параметры диффузии продуктов фотолиза при различных температурах

Температура, К	Общее число перескоков	Число обратных перескоков	Число эффективных перескоков	Частота перескоков, пс <sup>-1</sup>	Частота эффективных перескоков, пс <sup>-1</sup>	D · 10 <sup>9</sup> , м <sup>2</sup> ·с <sup>-1</sup>
Атомы Н						
50	0	0	0	0	0	1.1·10 <sup>-3</sup>
75	0	0	0	0	0	1.3·10 <sup>-3</sup>
100	7	2	5	7.0·10 <sup>-4</sup>	5.0·10 <sup>-4</sup>	8.8·10 <sup>-3</sup>
125	18	3	15	1.8·10 <sup>-3</sup>	1.5·10 <sup>-3</sup>	4.8·10 <sup>-2</sup>
150	98	30	68	9.8·10 <sup>-3</sup>	6.8·10 <sup>-3</sup>	3.1·10 <sup>-1</sup>
Радикалы ОН						
50	0	0	0	0	0	5.9·10 <sup>-4</sup>
75	72	67	5	7.2·10 <sup>-3</sup>	5.0·10 <sup>-4</sup>	3.8·10 <sup>-2</sup>
100	141	133	8	1.4·10 <sup>-2</sup>	8.0·10 <sup>-4</sup>	3.9·10 <sup>-2</sup>
125	38	28	10	3.8·10 <sup>-3</sup>	1.0·10 <sup>-3</sup>	6.9·10 <sup>-2</sup>
150	254	234	20	2.5·10 <sup>-2</sup>	2.0·10 <sup>-3</sup>	1.0·10 <sup>-1</sup>

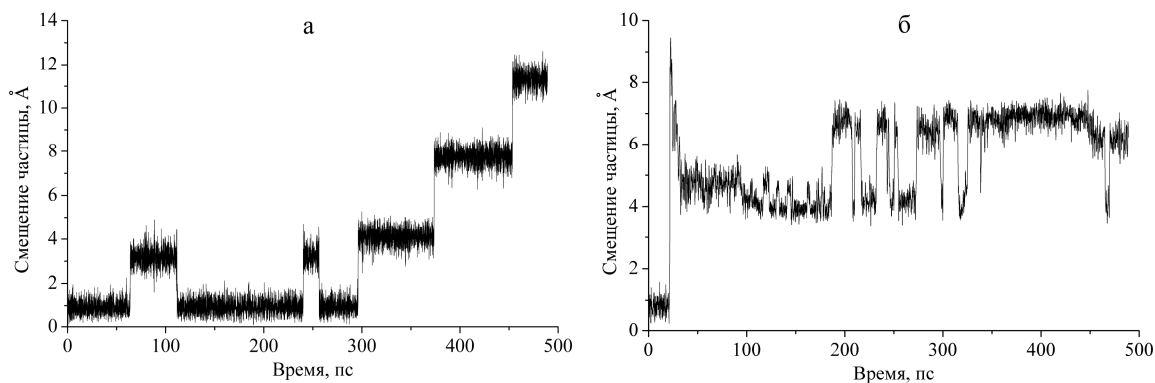


Рис. 2. Характерное перемещение атомов водорода (а) и радикалов ОН (б) внутри ледяного кристалла при 150 К

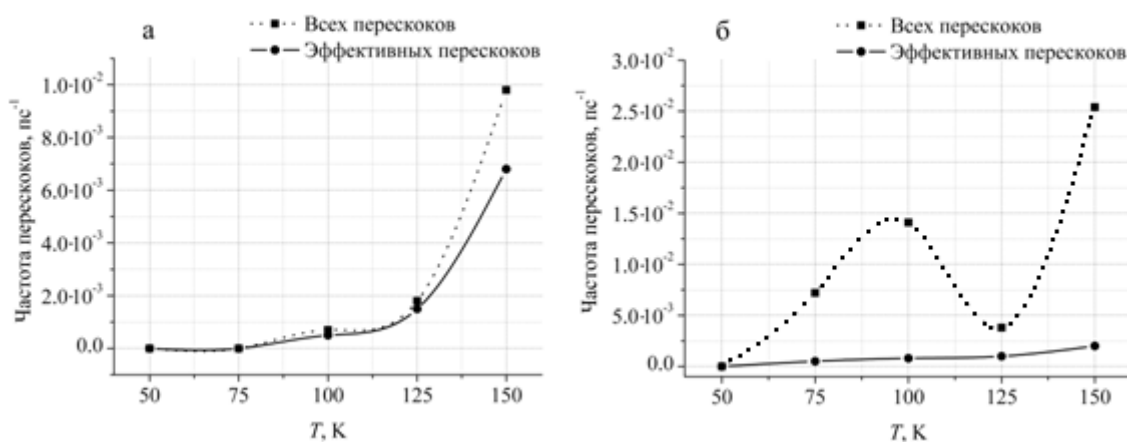
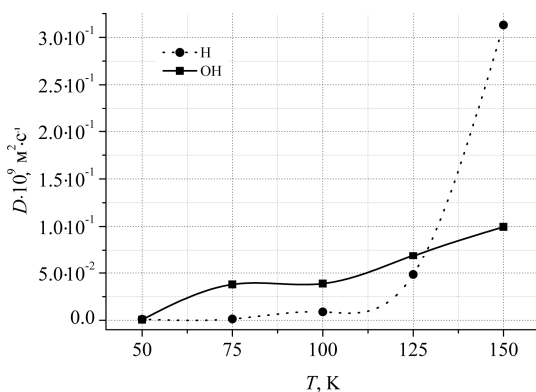


Рис. 3. Зависимость от температуры общего числа и числа «эффективных» перескоков атомов водорода (а) и радикалов ОН (б) внутри кристаллического льда



Коэффициенты диффузии, рассчитанные по уравнению (1) в интервале 50–150 К, представлены в табл. 2, их температурная зависимость показана на рис. 4. Отметим, что для расчета коэффициентов диффузии использовались финальные участки МД-траекторий, соответствующие конечным 10% времени расчета, что являлось дополнительной гарантией полного уравнивания системы.

Зависимость коэффициента диффузии атома водорода от температуры имеет ярко выражен-

ный экспоненциальный характер, то есть подчиняется уравнению Аррениуса. Аналогичная зависимость для гидроксил-радикала близка к линейной. Подобное различие, по-видимому, объясняется большей подвижностью атома водорода внутри ледяного кристалла вследствие его меньшего размера.

Абсолютные значения коэффициентов диффузии атомов водорода  $D_H$  в интервале температур 75–125 К несколько меньше, чем для ОН, однако, вследствие экспоненциальной зависи-

мости от температуры, быстро возрастает и при 150 К почти в три раза превышает  $D_{\text{ОН}}$ . Подобное различие, возможно, связано с тем, что в указанном интервале при повышении температуры влияние перескоков на величину коэффициента диффузии снижается, а основной вклад в диффузию вносит их перемещение вдоль бислоев. Возможно, медленная диффузия атомов Н при низких температурах объясняется их более сильной склонностью к захвату со стороны атома кислорода окружающих молекул  $\text{H}_2\text{O}$ . Разрушение «мгновенных» комплексов  $\text{H}\dots\text{O}_2\text{H}$  требует большего запаса кинетической энергии и происходит гораздо легче при повышении температуры. В поддержку этой точки зрения свидетельствует тот факт, что при перемещении гидроксил-радикалов в направлении, перпендикулярном бислоям, их перемещение медленнее, чем атомов водорода, так как частота перескоков ОН ниже. В случае перемещения ОН вдоль бислоя скорость диффузии ОН выше, о чем свидетельствуют коэффициенты диффузии, полученные в интервале температур 75–125 К. Также следует учитывать, что при температурах ниже 100 К движение атомов Н уже нельзя рассматривать как чисто классическое, и, таким образом, заметный вклад в коэффициент диффузии должен давать туннельный эффект [11].

### Заключение

В настоящем исследовании проведено молекулярно-динамическое моделирование динамики молекул воды, атомов водорода и радикалов ОН в кристаллической частице льда при температурах от 50 до 150 К, что соответствует условиям предполагаемых гетерогенных фотореакций генерации пероксида водорода, гидроксил-радикалов и других окислителей в верхних слоях атмосферы Земли (в мезосфере) на высотах порядка 80 км. На основании проведенного моделирования показано, что характер движения атомов водорода и гидроксил-радикалов в ледяной частице значительно различается. Движение атомов водорода представляет собой совокупность низкоамплитудного дрейфа (частых движений) и редких высокоамплитудных скачков, причем основной вклад в коэффициент диффузии вносит второй тип движения. В отличие от предшествующих работ, методом МД определены частоты перескоков, установлена их зависимость от температуры для всего интервала температур 50–150 К и оценены коэффициенты диффузии атомов к поверхности ледяной частицы. В случае радикалов ОН два типа движений дают примерно одинаковые вклады в коэффициент диффузии и, таким образом,

движение можно рассматривать как обычную диффузию, характеризуемую общим коэффициентом. Коэффициенты самодиффузии молекул воды, определенные в данной работе, согласуются с известными экспериментальными данными и подтверждают правильность проведенного моделирования.

*Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 10-05-01112, 11-03-00085).*

### Список литературы

1. Klán P., Holoubek I. // *Chemosphere*. 2002. V. 46. P. 1201–1210.
2. Boogert A., Ehrenfreund P. *Astrophysics of Dust: ASP Conference Series*. San Francisco: ASP, 2004. V. 309. 547 p.
3. Ehrenfreund P., Fraser H. *Solid State Astrochemistry*. Dordrecht: Kluwer, 2003. 317 p.
4. Ghormley J.A., Hochanadel C.J. // *J. Phys. Chem.* 1971. V. 75. P. 40–44.
5. Gerakines P.A., Schutte W.A., Ehrenfreund P. // *Astron. Astrophys.* 1996. V. 312. P. 289–305.
6. Westley M.S., Baragiola R.A., Johnson R.E., Baratta G.A. // *Planet. Space Sci.* 1995. V. 43. P. 1311–1315.
7. Westley M.S., Baragiola R.A., Johnson R.E., Baratta G.A. // *Nature (London)*. 1995. V. 373. P. 405–407.
8. Andersson S., Al-Halabi A., Kroes G.-J., Dishoeck E.F. // *J. Chem. Phys.* 2006. V. 124. P. 6471501–6471514.
9. Andersson S., Kroes G.-J., Dishoeck E.F. // *Chem. Phys. Lett.* 2005. V. 408. P. 415–421.
10. Arasa C., Andersson S., Cuppen H.M., Dishoeck E.F., Kroes G.-J. // *J. Chem. Phys.* 2010. V. 132. P. 1845101–1845112.
11. Markland T.E., Habershon S., Manolopoulos D.E. // *J. Chem. Phys.* 2008. V. 128. P. 19450601–19450611.
12. Allen M.P., Tildesley D.J. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1989. 385 p.
13. Pisani C., Casassa S., Ugliengo P. // *Chem. Phys. Lett.* 1996. V. 253. P. 201–208.
14. Hirsch T.K., Ojamäe L. // *J. Phys. Chem. B*. 2004. V. 108. P. 15856–15864.
15. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Gunsteren W.F., Hermans J. *Intermolecular Forces*. Dordrecht: Reidel, 1981. 331 p.
16. Mark P., Nilsson L. // *J. Phys. Chem. A*. 2001. V. 105. P. 9954–9960.
17. Todorov I.T., Smith W., Trachenko K., Dove M.T. // *J. Mater. Chem.* 2006. V. 16. P. 1911–1918.
18. Forester T.R., Smith W. // *J. Comput. Chem.* 1998. V. 19. P. 102–111.
19. Fennell C.J., Gezelter D.J. // *J. Chem. Phys.* 2006. V. 124. P. 23410401–23410412.
20. Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R. // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 3684–3690.
21. Vega C., Sanz E., Abascal J.L.F. // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 122. P. 1145071–1145079.
22. Chenevert T.L. // *Journal of Magnetic Resonance Imaging*. 2011. V. 34. P. 983–987.

**DYNAMICS AND DIFFUSION OF RADICALS FORMED DURING UV IRRADIATION OF WATER ICE.  
MOLECULAR DYNAMICS STUDY**

*N.V. Svinkov, S.K. Ignatov, M.Yu. Kulikov, A.G. Razuvaev*

A study of the behaviour of water molecules, hydrogen atoms and hydroxyl radicals in the crystalline water ice in the temperature range from 50 to 150 K has been carried out by the method of classical molecular dynamics. The particle motion character has been determined and diffusion and self-diffusion (for water molecules) coefficients in the given temperature range have been obtained.

*Keywords:* water ice, simulation, classical molecular dynamics, photolysis processes, radicals, diffusion.