



ФОАММ-2016



Российская академия наук

Новый Афон

16-27 августа

13-й Российский симпозиум

Фундаментальные основы атомистического
мультимасштабного моделирования

Тезисы докладов

2016 год

ОТДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИКИ, МАШИНОСТРОЕНИЯ, МЕХАНИКИ
И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ РАН
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РАН
КАВАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
13-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО
МУЛЬТИМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

«Foundations of Atomistic Multiscale Modeling and Simulation»

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Фортов В.Е., сопредседатель, Президиум РАН, ОИВТ РАН, Москва
Норман Г.Э., сопредседатель, ОИВТ РАН, Москва
Стегайлов В.В., зам. председателя, ОИВТ РАН, Москва
Савинцев А.П., зам. председателя, КБГУ, Нальчик
Тимофеев А.В., учёный секретарь, ОИВТ РАН, Москва
Анисимов М.А., University of Maryland, USA
Гельчинский Б.Р., Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург
Груздков А.А., Санкт-Петербургский государственный технологический институт (ТУ), Санкт-Петербург
Губин С.А., Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
Маневич Л.А., Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН, Москва
Псахье С.Г., Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск
Рудяк В.Я., Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (СИБСТРИН), Новосибирск
Фёдоров М.В., Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Норман Г.Э.,
Стегайлов В.В.,
Тимофеев А.В.

ЛОКАЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Даутия Ф.Т., Мэрия Нового Афона
Миканба А.З., Новоафонская средняя школа
Полупанова М.Л., Новоафонская средняя школа

Веб-сайт Симпозиума <http://ihed.ras.ru/afon16>

Под редакцией
Г. Э. Нормана, В. В. Стегайлова, А. В. Тимофеева

Благодарим В. С. Николаева и Н. Д. Орехова за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

В сборнике представлены тезисы докладов 13-го Российского симпозиума «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 16-27 августа 2016 г.) Школа-Симпозиум является продолжением серии симпозиумов по проблемам физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах, проводившихся в 2003-2013 годы. Название изменено в 2015 году, статус Школы придан с 2016 года.

Как и ранее, специфика Школы-Симпозиума предполагает рассмотрение широкого вопросов, в которых анализируется динамика процессов в конденсированном веществе на молекулярном уровне и/или связываются мезо- и макроскопические подходы с молекулярными процессами. Включены также процессы, оперирующие с отдельными фотонами. Междисциплинарность симпозиума позволяет рассматривать с единых позиций задачи, относящиеся к разным областям науки: физике, химии, биологии, инженерных наук и computer science. Школа-Симпозиум даёт прекрасную возможность для проведения научных дискуссий в неформальной обстановке, появления коопераций среди учёных.

Оригинальные доклады принимаются по следующим секциям.

- 1) Классическая молекулярная динамика
- 2) Квантовое атомистическое моделирование
- 3) Методы Монте Карло в статистической термодинамике и физической кинетике
- 4) Многомасштабные подходы, основанные на атомистическом моделировании
- 5) Наука о квантовой информации / Новости квантовой механики

Программа каждого заседания формируется оргкомитетом тематически:

- фазовые равновесия, метастабильные состояния и их распад, стёкла,
- проблемы материаловедения,
- неидеальная плазма и разогретое плотное вещество (warm dense matter),
- пылевая плазма,
- полимеры, биомолекулы и супрамолекулярные системы,
- научные основы нанотехнологий,
- наука о квантовой информации и др.

Заседание начинается с приглашённой тематической лекции.

По рекомендации лекторов и решению программного комитета, в программу заседаний могут быть включены доклады по вопросам, смежным с молекулярным/ атомистическим моделированием и теорией распространения одиночных фотонов, и экспериментальные работы, которые можно использовать для верификации моделирования и теории.

Представление оригинальных работ осуществляется только в форме устных докладов. Официальный язык Школы-Симпозиума - русский.

Предполагается определение лучших докладчиков по номинациям:

студенты,
молодой учёный без степени,
молодой кандидат наук.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Введенский Н.В., Костин В.А., Романов А.А., Силаев А.А.</i> Квантовомеханическое моделирование генерации предельно коротких частотно-перестраиваемых импульсов в среднем инфракрасном диапазоне длин волн при ионизации газа двухцветными лазерными импульсами	4
<i>Губин С.А., Богданова Ю.А., Анисеев А.А., Маклашова И.В., Губина Т.В.</i> Расчет термодинамических параметров двухкомпонентных смесей	4
<i>Кирова Е.М., Норман Г.Э., Писарев В.В.</i> Исследование вязкости жидкого алюминия в процессе стеклования методом молекулярной динамики	5
<i>Кондратьев Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.</i> Согласованный расчет коэффициента диффузии $n\text{-C}_{30}\text{H}_{62}$ методами молекулярной динамики	5
<i>Куриленков Ю.К., Тараканов В.П.</i> PIC-моделирование ядерного горения протон – бор в потенциальной яме виртуального катода в наносекундном вакуумном разряде.	6
<i>Ланкин А.В.</i> Рекомбинация ионов в газах высокой плотности	6
<i>Ленёв Д.Ю., Норман Г.Э.</i> Термическая аккомодация при соударениях холодных атомов аргона с кластерами железа при различных температурах	7
<i>Мазо М.А., Зубова Е.А., Стрельников И.А., Маневич Л.И.</i> Новая крупнозернистая модель для кристаллических фаз полиэтилена	7
<i>Николаев В.С., Тимофеев А.В.</i> Зависимость расстояния между частицами в плазменно-пылевых структурах от температуры и концентрации нейтрального газа и концентрации пылевых частиц	7
<i>Норман Г.Э.</i> Атомистический многомасштабный взгляд на мир как мировоззрение и метод исследований	8
<i>Норман Г.Э., Саитов И.М.</i> Плазменный фазовый переход в разогретом плотном водороде	8
<i>Одинокоев А.В., Остроумов Д.С.</i> Воздействие неполярных растворителей на липидный бислой	9
<i>Одинокоев А.В.</i> Локальные искажения решётки и дырочные ловушки вокруг примесных молекул в кристалле антрацена	9
<i>Одинокоев А.В.</i> Метод молекулярной динамики в исследовании строения и стабильности супрамолекулярных комплексов включения	10
<i>Орехов Н.Д., Стегайлов В.В.</i> Моделирования взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с алюминиевыми наночастицами	10
<i>Павлов С.В., Кисленко С.А.</i> МД моделирование межфазной границы электрод/электролит в Li -воздушных системах	11
<i>Ридный Я.М., Мирзоев А.А.</i> Модель парамагнитного состояния в ГЦК-железе, используемая для расчёта энергетических параметров углерода	11
<i>Рудяк В.Я., Лежнев Е.В.</i> Стохастическое моделирование процессов переноса в газах	12
<i>Рыльцев Р.Е., Клунов Б.А., Щелкачев Н.М., Шуныев К.Ю.</i> Компьютерное моделирование структуры аморфизирующихся сплавов Cu-Zr	12
<i>Семёнов В.П., Тимофеев А.В.</i> Перенос энергии между степенями свободы в плазменно-пылевой системе	13
<i>Тимофеев А.В.</i> Уникальные свойства пылевой плазмы	13
<i>Федоров М.В.</i> Перепутывание состояний как важнейший элемент современной науки о квантовой информации	14
<i>Фомин А.А.</i> Процесс теплопередачи при нагреве ТВЧ и рост оксидных нано- и субмикрометровых структур на поверхности титана	14
<i>Шарилов З.А., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Христов И.Г., Христова Р.Д.</i> Непрерывно-атомистический подход для моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий с конденсированными средами	15
<i>Щелкачев Н.М., Рыльцев Р.Е., Клунов Б.А.</i> Конкуренция масштабов как механизм стеклования и квазикристаллизации	15
<i>Юрьев А.А., Гельчинский Б.Р., Вязникова Е.А.</i> Возможности первопринципной молекулярной динамики для прогнозирования свойств жидких s-, s-r и d- металлов, включая экстремальные состояния	16
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	17
ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ	18

КВАНТОМЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИХ ЧАСТОТНО-ПЕРЕСТРАИВАЕМЫХ ИМПУЛЬСОВ В СРЕДНЕМ ИНФРАКРАСНОМ ДИАПАЗОНЕ ДЛИН ВОЛН ПРИ ИОНИЗАЦИИ ГАЗА ДВУХЦВЕТНЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

*Введенский Н.В.^{*1}, Костин В.А.¹, Романов А.А.², Силаев А.А.¹*

¹ ИИФ РАН, Нижний Новгород, ² ННГУ, Нижний Новгород

**vved@appl.sci-nnov.ru*

Исследуется новый метод генерации предельно коротких импульсов в среднем инфракрасном диапазоне длин волн, основанный на ионизации газа ультракороткими двухцветными лазерными импульсами, содержащими поля на двух различных частотах, при этом одна из частот перестраивается вблизи удвоенного (или половинного) значения другой частоты. Такие двухцветные лазерные импульсы могут быть получены с использованием кристаллов удвоения частоты или параметрических генераторов света [1, 2]. В настоящей работе проводится квантовомеханическое моделирование возбуждения электронного тока в плазме, создаваемой в процессе ионизации газа такими двухцветными лазерными импульсами, на основе решения трехмерного нестационарного уравнения Шредингера. Найдены зависимости эффективности возбуждения и спектра тока от интенсивностей и частот одноцветных компонент лазерного импульса. Показано, что возбуждение электронных токов в плазме может быть интерпретировано как ионизационно-индуцированное многоволновое смещение (возбуждение комбинационных частот), приводящее, в частности, к генерации излучения на частотах, значительно более низких, чем частоты компонент двухцветного лазерного импульса. При этом длительность генерируемого импульса определяется характерным временем создания плазмы и может быть значительно меньше, чем длительность ионизирующего импульса. Полученные в ходе моделирования результаты показывают, что такое ионизационно-индуцированное многоволновое смещение может быть использовано для эффективной генерации предельно коротких (содержащих малое число периодов поля) импульсов, перестраиваемых в диапазоне длин волн от нескольких до нескольких десятков микрометров.

Работа выполнена при поддержке гранта Правительства РФ № 14.B25.31.0008 и гранта РФФИ № 14-02-00847.

1. Vvedenskii N.V. et al. // Phys. Rev. Lett. 2014. V.112. P.055004.
2. Balciunas T. et al. // Opt. Express. 2015. V.23. P.15278.

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ

Губин С.А.^{}, Богданова Ю.А., Аникеев А.А., Маклашова И.В., Губина Т.В.*

НИЯУ МИФИ, Москва

**gubin_sa@mail.ru*

Для практики большое значение имеют термодинамические расчеты флюидных смесей (газов и жидкостей при критических или сверхкритических условиях) при высоких плотностях и давлениях. Свойства диссоциированных N_2 , O_2 , и смеси $NH_3 + H_2$ представляют большой интерес, так как эти вещества являются продуктами горения и детонации энергоемких веществ и при этом находятся при сверхкритических условиях. Рассматриваемые смеси являются двухкомпонентными флюидами. Для описания взаимодействия молекул компонентов флюидной смеси при сверхкритических условиях может быть применен потенциал Ехр-6 (модифицированный потенциал Букингема). Потенциал Ехр-6 с постоянными значениями своих параметров хорошо описывает межмолекулярные силы только для веществ с неполярными или почти неполярными молекулами, но оказывается слишком грубым приближением для полярных молекул, в особенности для молекул с водородными связями (H_2O и NH_3). В [1] показано, что дополнение потенциала температурной зависимостью повышает точность расчетов.

Проведены расчеты термодинамических параметров ударно-волнового сжатия изучаемых двухкомпонентных смесей: N_2+N , O_2+O и изотермы смеси $NH_3 + H_2$:

- с использованием модели УРС двухкомпонентных флюидных смесей, основанной на теории возмущений [2];
- с применением эффективной модели однокомпонентного флюида [3];
- путем моделирования методом МК с использованием компьютерной программы Towhee [4].

Избыточные термодинамические параметры многокомпонентного флюида с потенциалами Ехр-6, на основе модели УРС однокомпонентного флюида находились на основе модели эффективного однокомпонентного флюида vdW1f [3]. Расчеты выполнены для следующих двух моделей:

1. Модель УРС двухкомпонентных флюидных смесей [2] разработана на основе теории возмущений KLR с использованием радиальных функций распределения молекул [5] с потенциалами Ехр-6. Эта модель реализована в виде вычислительного алгоритма и компьютерной программы.

2. В модели vdW1f предполагается, что избыточные термодинамические свойства многокомпонентной флюидной фазы совпадают с соответствующими свойствами гипотетического (эффективного) однокомпонентного флюида с потенциалом Ехр-6. Расчеты выполнялись на основе термодинамического кода [3, 5].

Результаты Монте-Карло (МК) моделирования были получены с помощью программы Towhee [4]. Вычисления проводились с использованием NVT-ансамбля, где $N=1000$ – полное число частиц в моделировании внутри кубической ячейки (коробки) с периодическими граничными условиями. После установления равновесия внутренняя энергия и вириальное давление были рассчитаны путем усреднения $5 \cdot 10^5$ конфигураций. Радиус обрезания потенциалов межмолекулярного взаимодействия выбран равным половине длины ребра кубической коробки.

Сравнение расчетов с результатами моделирования МК позволяет заключить, что теоретическая модель УРС [2] превосходит модель эффективного однокомпонентного флюида по точности и надежно описывает термодинамические свойства двухкомпонентных флюидных смесей в широком диапазоне давлений и температур.

1. Gubin S.A., Victorov S.B., et.al. // Russian Journal of Physical Chemistry B. 2015. V.9. N.3. P.392.
2. Bogdanova Yu.A., Gubin S.A., et.al. // High Temperature. 2015. V.53. N.4. P.481.
3. Victorov S.B., El Rabii H., Gubin S.A., Maklashova I.V., Bogdanova Yu.A. // J. Energetic Mater. 2010. V.28. P.35.
4. MCCC Towhee; <http://towhee.sourceforge.net>
5. Богданова Ю.А., Викторov С.Б., и др. // Известия вузов. Физика. 2010. Т.53. N.2. С.10.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЯЗКОСТИ ЖИДКОГО АЛЮМИНИЯ В ПРОЦЕССЕ СТЕКЛОВАНИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кирова Е.М. , Норман Г.Э., Писарев В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**kirova@phystech.edu*

В работе проведено исследование поведения коэффициента кинематической вязкости в процессе стеклования методом молекулярной динамики. Основной мотивацией для этой работы послужило различие в температурах стеклования, полученных при помощи критерия, основанного на изменении теплоемкости, и других трех критериев (расщепление второго пика парной корреляционной функции, образование кластеров, рост энергии активации самодиффузии). Главный вопрос нашей работы состоял в том, чтобы определить, как соотносятся эти две температуры, и какую температуру даст вязкостный критерий.

При моделировании процесса изобарного охлаждения расплава использован потенциал погруженного атома. В начальном состоянии атомы располагались в половине объема расчетной ячейки в виде пленки. Чтобы избежать граничных эффектов, были использованы периодические граничные условия. Далее проводилось изобарное охлаждение с постоянной скоростью. Так как в расчетной ячейке атомы занимают лишь половину объема, то пленка может менять свою толщину в процессе охлаждения. Таким образом, давление в пленке остается постоянным.

Для расчета сдвиговой вязкости η использовалась формула Грина-Кубо. Расчет проводился при помощи программного пакета LAMMPS MD software.

Были получены автокорреляционные функции сдвигового напряжения в плоскости пленки и вдоль направления, перпендикулярного пленке, в диапазоне температур 300–1200 К. Получена зависимость вязкости от температуры. Для температур выше температуры стеклования было проведено сравнение с экспериментом.

Также в работе была найдена температура, после которой система перестает быть эргодичной. Она согласуется с температурой, полученной при помощи калориметрического критерия.

При более подробном исследовании поведения автокорреляционных функций во всем диапазоне температур на малых временах обнаружены две экспоненциальные асимптотики, т.е. два различных режима релаксации. На больших временах при всех рассмотренных температурах наблюдалась степенная зависимость. Была получена зависимость показателя степени от температуры, и исследована ее связь с температурами стеклования, полученными при помощи других критериев.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ №14-50-00124 Российской Академии Наук.

1. Рапапорт Д.К. Искусство молекулярной динамики. Ижевск: ИКИ, 2012.
2. Norman G.E., Stegailov V.V. // Mathematical Models and Computer Simulations. 2013. N.5. P.305.
3. Kolotova L.N., Norman G.E., Pisarev V.V. // J. Non-Cryst. Solids. 2015. N.429. P.98.
4. Pisarev V.V. // J. Phys. Chem. A. 2014. N.88. P.1382.
5. Ladyanov V.I., Beltyukov A.L., Menshikova S.G., Korepanov A.U. // Phys. and Chem. of Liquids. 2014. N.52. P.46.

СОГЛАСОВАННЫЙ РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ Н-С₃₀Н₆₂ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кондратьюк Н.Д. , Норман Г.Э., Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

**kondratyuk@phystech.edu*

Современная промышленность заинтересована в исследовании реологии жидких углеводородов, так как они являются основными составляющими масел и топлив. Существуют работы, детально описывающие расчет транспортных свойств атомных систем [1], но в случае молекулярных жидкостей возникают дополнительные сложности с применением классических методов [2-4].

В данной работе методами классической молекулярной динамики изучаются диффузионные процессы в высшем н-алкане С₃₀Н₆₂. Расчеты проводятся в четырех наиболее распространенных потенциалах (TraPPE-UA [5], DREIDING [6], OPLS-AA [7], L-OPLS-AA [8]). Использование различных потенциалов необходимо для оценки систематической погрешности полученных результатов. Коэффициент самодиффузии центров масс молекул рассчитывается методами Эйнштейна-Смолуховского ($\langle \Delta r^2 \rangle = 6D_{ES}t$) и Грина-Кубо ($D_{GK} = \int_0^\infty C_v(t)dt/3$).

Процесс самодиффузии в н-алканах отличается от броуновского: в зависимости $\langle \Delta r^2 \rangle(t)$ наблюдается субдиффузионный участок. Анализ траекторий отдельных молекул и их динамики позволяет понять причины подобного замедления диффузии. Асимптотики автокорреляционной функции скоростей центров масс молекул $C_v(t)$, необходимой для расчета коэффициента диффузии методом Грина-Кубо, при разных температурах сравниваются с классической гидродинамической асимптотикой, предсказанной для атомных жидкостей [9]. Будет продемонстрировано влияние данных аналитических продолжений функции $C_v(t)$ на сходимость результатов, полученных методами Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо. Зависимость коэффициента самодиффузии от температуры также рассматривается в данной работе. Проводится сравнение полученных коэффициентов самодиффузии D_{ES} и D_{GK} с экспериментальными данными.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ №14-50-00124 Российской Академии Наук.

1. Viscardy, S., Servantie, J. and Gaspard, P. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 1.
2. Kowsari, M. H. et al. // J. Chem. Phys. 2008. V. 129. P. 224508.
3. Liu, H. et al. // Ind. Eng. Chem. Res. 2012. V. 51(21). P. 7242.
4. Zhang, Y. et al. // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. P. 3537.
5. Martin M. G. and Siepmann J. I. // J. Phys. Chem. B. 1998. V. 102(14). P. 2569–2577.
6. Jorgensen, W. L., Maxwell, D. S. and Tirado-Rives, J. // J. Am. Chem. Soc. 1996. V. 118(45). P. 11225–11236.
7. Mayo S. L., Olafson B. D. and Goddard III W. A. // J. Phys. Chem. 1990. V. 101(540). P. 8897–8909.
8. Siu S. W. I., Pluhackova K. and Bockmann, R. A. // J. Chem. Theory Comput. 2012. V. 8. P. 1459.
9. Alder, B. J. and Wainwright, T. E. // Phys. Rev. A. 1970. V. 1(1). P. 18.

РІС-МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯДЕРНОГО ГОРЕНИЯ ПРОТОН – БОР В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ ВИРТУАЛЬНОГО КАТОДА В НАНОСЕКУНДНОМ ВАКУУМНОМ РАЗРЯДЕ.

Куриленков Ю.К.*, Тараканов В.П.

ОИВТ РАН, Москва,

*kurilenkovyuri@gmail.com

Ранее в эксперименте с компактным наносекундным вакуумным разрядом (НВР) малой энергии и с дейтерированным палладиевым анодом наблюдался выход DD нейтронов [1]. В дальнейшем, детальное РІС-моделирование в рамках полного электродинамического кода KARAT обнаружило [2], что в эксперименте с НВР была фактически реализована довольно известная схема инерционного электростатического удержания (ИЭУ) [3,4]. В данной работе мы сообщаем о прогрессе в исследовании ядерного горения в схеме ИЭУ на основе НВР. Конкретное направление - это моделирование безнейтронной реакции ядерного горения протон-бор. Эта реакция сопровождается выходом лишь трёх быстрых альфа-частиц ($p + {}^{11}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^8\text{Be}^* \rightarrow 3\alpha$) и имеет большой фундаментальный и прикладной интерес [4,5]. Поскольку выход энергии здесь имеет место посредством α -частиц, это, в принципе, позволяет обеспечить прямую конверсию кинетической энергии α -частиц в электричество. Однако, реализация синтеза $p + {}^{11}\text{B}$ требует таких экстремальных параметров плазмы, которые трудно достичь в хорошо известных схемах контролируемого термоядерного синтеза [4]. Тем не менее, попытки получить нужные параметры плазмы продолжаются, и интерес к проблеме ядерного горения протон-бор постоянно растёт. К настоящему времени наилучшим образом развиты лазерные схемы горения $p + {}^{11}\text{B}$, в которых используются композитные мишени и создаются специальные условия взаимодействия лазер-мишень и наблюдается выход вплоть до $\sim 10^9$ α -частиц за выстрел [6-8]. Отметим, что схема ИЭУ одна из немногих, где энергии ионов, требуемые для осуществления реакции $p + {}^{11}\text{B}$, могут быть также достигнуты [5].

Целью настоящей работы по моделированию реакции протон-бор является изучение особенностей горения $p + {}^{11}\text{B}$ в схеме ИЭУ на основе НВР. Поскольку предыдущее РІС моделирование кодом KARAT очень хорошо описало экспериментальные результаты по DD синтезу в НВР ранее [2], сейчас мы хотели бы опереться на детальное моделирование горения $p + {}^{11}\text{B}$ в НВР для обоснованного планирования нового эксперимента.

Работа поддержана грантом N 14-50-00124 Российского Научного Фонда.

1. Yu.K. Kurilenkov, M. Skowronek and J.Duffy // J.Phys. A. 2006. V.415. P.4375.
2. Yu.K. Kurilenkov, V.P. Tarakanov et al. // J. Phys.: Conf. Ser. 2015. V.653. P.012025.
3. Lavrent'ev O A. 2012. On the history of thermonuclear synthesis in USSR, 2-nd edition (in russ.) (Kharkov, Ukraine: Kharkov Phys.-Tech. Inst. (KhPhTI)).
4. S. Atzeni, J. Meyer-Ter-Vehn. 2004. The Physics of Inertial Fusion. (Oxford Science Publication).
5. Miley G and Murali S K. 2014. Inertial Electrostatic Confinement (IEC) Fusion (Springer, New York).
6. Belyaev V S, Matafonov A P, Vinogradov et al // Phys.Rev.E. 2005. V.72. P.026406-5.
7. Labaune C, Baccou C, Depierreux S et al // Nature Communications. 2013. V.4. P.2506.
8. Picciotto A, Margaroni D, Velyhan A et al // Phys.Rev.X. 2014. V.4. P.031030.

РЕКОМБИНАЦИЯ ИОНОВ В ГАЗАХ ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ

Ланкин А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

Alex198508@yandex.ru

Рассмотрен процесс рекомбинации ионов в плотных газах при различных вариантах выбора свойств среды и иона. Установлена зависимость константы скорости рекомбинации ионов в газе от концентрации фонового газа. Получены условия для положения областей с различными режимами кинетики рекомбинации. При малых значениях плотности фонового газа константа скорости рекомбинации зависит от неё линейно и в области малых параметров неидеальности согласуется с классической моделью Натансона. Данная область соответствует столкновительному режиму рекомбинации. Её границы определяются условием $n\sigma < L^{-1}$, где n - концентрация нейтральных молекул, σ - сечение столкновений молекул и ионов, $L = e^2/kT$ - длина Ландау. При больших значениях концентрации фонового газа работает модель Ланжевена, где константа скорости рекомбинации ионов обратно пропорциональна концентрации фонового газа. Данная область определяется условием $n\sigma > 4L^{-1}$, здесь рекомбинация происходит в диффузионном режиме. В промежуточной области $L^{-1} < n\sigma < 4L^{-1}$ имеет место сложная немонотонная зависимость скорости рекомбинации от концентрации фонового газа с максимумом в области $n\sigma = 4L^{-1}$.

Произведено исследование зависимости константы скорости рекомбинации в плотных газах от параметра кулоновской неидеальности системы в области, где имеет место её диффузионный режим. Данная проблема имеет существенное значение при описании разрядов в атмосферном воздухе [1, 2] и описании восстановления электрической прочности газовых диэлектриков после пробоя в высоковольтном оборудовании. Установлено, что вопреки имеющим место в литературе представлениям об отсутствии зависимости скорости рекомбинации в диффузионном режиме от параметра кулоновской неидеальности [3] в действительности такая зависимость сохраняется, хотя и оказывается существенно слабее той, которая наблюдается для ионных систем в столкновительном режиме. Данная зависимость может быть интерполирована в диапазоне всех значений параметра неидеальности экспоненциально спадающей кривой. Крутизна уменьшения константы скорости рекомбинации с ростом кулоновского параметра неидеальности уменьшается с увеличением концентрации фонового газа и, как следствие, уменьшением длинных свободного пробега ионов. Интерполируя эту закономерность в область очень больших значений плотности можно предположить, что в жидкостях она должна быть незначительна. Тем не менее для газов в области давлений от одной атмосферы до нескольких десятков атмосфер данный эффект может быть весьма существенным.

Работа выполнена при поддержке по гранту Президента РФ № МК-9285.2016.8.

1. Aleksandrov N. L., Kindysheva S. V., Nudnova M. M. et al.// J. Phys. D – App. Phys. 2010. V. 43, Iss. 25. P. 255201
2. Heptner A., Cochems P., Langejuergen J et al.// Analyst. 2012. V. 137. P. 5105
3. Bates D.K.// J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1982. T. 15. P. L119.

ТЕРМИЧЕСКАЯ АККОМОДАЦИЯ ПРИ СОУДАРЕНИЯХ ХОЛОДНЫХ АТОМОВ АРГОНА С КЛАСТЕРАМИ ЖЕЛЕЗА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Ленёв Д.Ю.*, Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва,

*lenevdy@mail.ru

Рассчитываются коэффициенты термической аккомодации для соударений единичных атомов аргона при комнатной температуре с железными кластерами при температурах 200–2500 К. Применён метод молекулярной динамики. Для описания взаимодействия между атомами железа в кластере использован потенциал Финниса–Синклера. Налетающий атом взаимодействует с кластером через потенциал Букингема. Рассмотрено от 10000 до 100000 траекторий налетающего атома. Начальные скорости налетающего атома подчиняются распределению Максвелла. Коэффициент термической аккомодации рассчитан для кластеров из 9 и 27 частиц.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ №14-50-00124 Российской Академии Наук.

НОВАЯ КРУПНОЗЕРНИСТАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ФАЗ ПОЛИЭТИЛЕНА

Мазо М.А.*, Зубова Е.А., Стрельников И.А., Маневич Л.И.

ИХФ РАН, Москва,

*mikhail.mazo1@gmail.com

Крупнозернистая модель (КЗ) полиэтилена (ПЭ) и парафинов (модель из «объединенных атомов», в которой CH_2 -группа заменяется одним зерном), предложенная несколько десятков лет назад, широко применяется в молекулярно-динамическом моделировании [1-3]. При этом считалось, что КЗ модель ПЭ не может воспроизвести обычную для ПЭ кристаллическую орторомбическую фазу [4]. Однако сделанный нами корректный выбор геометрических параметров зигзага для скелета цепи ПЭ позволил в рамках КЗ модели воспроизвести все известные полиморфные модификации кристаллического полиэтилена [5]. Как оказалось, для этого было достаточно зерно (силовой центр с массой CH_2 -группы) сместить относительно центра атома углерода в сторону водородов, при этом все взаимодействия, как валентные, так и невалентные, определяются положением этих зерен. Была найдена область геометрических параметров модели, при которых все три известные кристаллические фазы ПЭ являются равновесными при низких температурах. В данной работе были уточнены параметры модели (величина смещения зерен и их Ван-дер-Ваальсовый радиус) и подобраны силовые константы модели таким образом, чтобы спектр ее линейных возбуждений воспроизводил низкочастотный спектр неупругого нейтронного рассеяния орторомбического ПЭ. Оказалось, что для рассматриваемой модели выбор силовых констант можно осуществить однозначно. Проводится сравнение дисперсионных кривых в терагерцовом диапазоне с экспериментальными частотами, полученными методами рамановского рассеяния и инфракрасной спектроскопии. Все кристаллические фазы ПЭ: орторомбическая, триклинная и моноклинная были устойчивы и при температуре 300 К. Обсуждаются достоинства и недостатки рассматриваемой КЗ модели.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 16-13-10302). Вычислительные ресурсы предоставлены межведомственным суперкомпьютерным центром РАН.

1. Karimi-Varzaneh H.A., Muller-Plathe F. // Top. Curr. Chem. 2012. V. 307. P. 295.
2. Yeh I.-C., Andzelm J.W., Rutledge G.C. // Macromol. 2015. V. 48. №12. P. 4228.
3. Makrodimitri Z.A., Heller A., Koller T.M. et al. // J. Chem. Thermodynamics 2015. V. 91. P. 101.
4. Wunderlich B. // Academic Press. 1973. V. 1. Chapter 2.3.6.
5. Zubova A., Savin A.V., Balabaev N.K. // arXiv:1109.0947. Sep. 2011.

ЗАВИСИМОСТЬ РАССТОЯНИЯ МЕЖДУ ЧАСТИЦАМИ В ПЛАЗМЕННО-ПЫЛЕВЫХ СТРУКТУРАХ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ И КОНЦЕНТРАЦИИ ГАЗА И ПЫЛЕВЫХ ЧАСТИЦ

Николаев В.С.*, Тимофеев А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

*vladiorussia@mail.ru

Зависимость расстояния между пылевыми частицами, взвешенными в тлеющем разряде постоянного тока, от различных параметров окружающей плазмы и самих пылевых структур, является актуальным вопросом. Изучение этой зависимости позволяет исследовать ионный состав плазмы при разных температурах, вид потенциала взаимодействия пылевых частиц, эффекты, влияющие на образование различных типов структур (ионное увлечение, ion wake, термофорез и т.д.) [1].

Представлены результаты измерения межчастичных расстояний по экспериментальным данным, полученным в тлеющем разряде гелия группой А.В. Кириллина, В.П. Баева, И.С. Самойлова в ОИВТ РАН в 2010-2012 гг. Произведено сравнение полученных результатов с классификацией, опубликованной в [2], классификация дополнена.

Уравнение равновесия частицы решено в двухчастичной модели с использованием потенциала Дебая [3] относительно межчастичного расстояния двумя методами: численно и с использованием разложения по малому параметру в предположении, что межчастичное расстояние отличается от длины экранирования на величину малой поправки. Решения совпадают в диапазоне температур 200-300 К.

Произведено моделирование плазменно-пылевой системы в пакете LAMMPS. Построены зависимости межчастичного расстояния от температуры нейтрального газа и концентрации пылевых частиц.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

1. Fortov V.E., Morfill G.E. Complex and dusty plasmas from laboratory to space. London: CRC Press, 2012.
2. Polyakov D.N., Vasilyak L.M., Shumova V.V. Synergetics of dusty plasma and technological aspects of the application of cryogenic dusty plasma. // Surf. Eng. Appl. Electrochem. 2015. V.51. P.143-151.
3. Tsytovich V.N., Morfill G.E., Vladimirov S.N., Thomas H.N. Elementary physics of complex plasmas. Springer, 2008.

АТОМИСТИЧЕСКИЙ МНОГОМАСШТАБНЫЙ ВЗГЛЯД НА МИР КАК МИРОВОЗЗРЕНИЕ И МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЙ

Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва

genri.norman@gmail.com

Эпиграфом к докладу выбраны слова Фейнмана: «Самой плодотворной мыслью, сильнее всего стимулирующей прогресс в биологии, является, по-видимому, предположение о том, что все, что делают животные, это делают атомы, что в живой природе все результат каких-то физических и химических процессов, а сверх этого ничего нет».

Возникновение атомистических представлений связано с именами Демокрита, Эпикура, Кара и индийских философов. Их новое рождение обязано Бруно, Галилею, Декарту. Особое место принадлежит Ньютону. Выдающийся вклад внёс Лаплас, выдвинувший концепция, известную как лапласовский детерминизм. Поучительны биография Лапласа и знаменитый диалог: Наполеон – Вы написали такую огромную книгу о системе мира и ни разу не упомянули о его Творце! Лаплас – Сир, я не нуждался в этой гипотезе. Идеи детерминизма разделяли выдающиеся учёные, в частности, Пуанкаре и Эйнштейн. Атомистические представления развивали Дальтон, Броун, Гей-Люссак, Авогадро, Джоуль, Клаузиус, Максвелл, Больцман, Эйнштейн, Смолуховский. Среди противников выделяются Мах и Оствальд. Точку поставили эксперименты Перрена лишь в 1912 году. К этому времени уже бурно развивалась электронная теория вещества.

Рассматривается место атомистических представлений в науке XXI века, развивающих достижения второй половины XX века. Центральными здесь являются попытки построения иерархии понятий и представлений, принятые Фейнманом, Медаваром, Лоренцем и Пошпером и исходящие из посылки, что при исследовании любых проблем природы, общества, человеческой культуры и человеческого духа нужно пользоваться методами естествознания. Это созвучно взглядам Планка, что существует непрерывная цепь от физики и химии через биологию и антропологию к социальным наукам. При этом в основе всех предложенных иерархий является ступень основных законов и атомистический подход. Рабочие варианты построения следующих ступеней получили в XXI веке название многомасштабных подходов.

Принципиально, что любые утверждения, истинные и имеющие смысл для какого-либо уровня, ступени или науки, являются также истинными и имеющими смысл для каждого уровня или науки, занимающих любую более высокую ступень в иерархии. Обратное же не справедливо. Каждый уровень, ступень или наука включает не только информационное содержание наук, стоящих в списке ниже ее, но и свои собственные специфические понятия, которые вовсе не появляются на более низких уровнях.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 14-19-01295.

ПЛАЗМЕННЫЙ ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В РАЗОГРЕТОМ ПЛОТНОМ ВОДОРОДЕ

Норман Г.Э., Саитов И.М.*

ОИВТ РАН, Москва

**saitovilnur@gmail.com*

Сделан обзор исследований водорода и дейтерия при высоких давлениях и температурах от низких до высоких. Рассмотрены как состояния твёрдого водорода, так и его плавление. Основное внимание уделяется фазовому переходу флюид-флюид, который наблюдается экспериментально при температурах 103-104 К в мегабарном диапазоне давлений. Проводится сопоставление с фазовым переходом жидкость-жидкость с тройной точкой на линии плавления. Переход наблюдается для селена, теллура, олова, серы, висмута, церия, фосфора и некоторых других веществ.

Выдвинута новая идея, что фазовый переход флюид-флюид в разогретом плотном водороде связан не с диссоциацией или металлизацией водорода, как это принято предполагать, а с ионизацией молекулярного водорода H_2 с образованием молекулярных ионов H_2^+ . Показано, что это справедливо во всём диапазоне параметров, где проводились эксперименты. Инструментом исследования является квантовая молекулярная динамика. Рассчитываются протонные парные корреляционные функции (ПКФ). Они являются средством диагностики фазового перехода и выяснения его природы. Все нетривиальные изменения этих функций при увеличении плотности водорода происходят в области расстояний, близких к меядерным расстояниям в молекуле водорода H_2 и молекулярного иона H_2^+ . Выявлены скачки ПКФ, указывающие на фазовый переход во всём температурном диапазоне. Обнаружение метастабильных состояний подтверждает, что фазовый переход является первого рода. Критическая температура оценивается близкой к 4000 К. Скачки плотности сопровождаются скачками электропроводности.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 14-19-01295.

ВОЗДЕЙСТВИЕ НЕПОЛЯРНЫХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ НА ЛИПИДНЫЙ БИСЛОЙ

Одинокоев А.В., Остроумов Д.С.*

ЦФ РАН, Москва, RU

**ale.odinokov@gmail.com*

В гетерогенной среде, где вода соседствует с неполярными органическими растворителями, молекулы гидрофобной фазы могут накапливаться внутри липидных мембран, погружённых в воду. Такая ситуация типична при использовании бактерий в биохимическом производстве или для очистки загрязненной почвы и грунтовых вод. Также этот эффект возникает при воздействии анестетиков на клетки центральной нервной системы. В результате проникновения гидрофобных молекул заметно изменяются физико-химические свойства мембран и угнетаются их физиологические функции. Происходит набухание липидного бислоя, уменьшение его микровязкости, при больших концентрациях гидрофобного агента мембрана разрушается. Эти явления лежат в основе токсического воздействия органических растворителей на бактерии, а также дают вклад в механизм действия анестетиков (до конца ещё не изученный).

С помощью метода молекулярной динамики было произведено моделирование проникновения бензола в бислой димиристоил-фосфатидил-холина. Наблюдалось увеличение удельной площади бислоя, его толщины, а также коэффициента диффузии молекул липидов, как трансляционной, так и вращательной. При этом упорядоченность ацильных цепей заметно не менялась. Зависимость свойств бислоя от концентрации бензола проявляет два режима, разделённые пределом растворимости бензола в воде. При достижении этой точки между монослоями липидов начинает накапливаться слой чистого бензола, соответствующий зародышу новой фазы.

Разрушения бислоя, в том числе образования в нём пор, наблюдать не удалось, в том числе в длительных (300 нс) МД экспериментах. Более того, специально предорганизованные поры в бислое закрывались даже несколько быстрее, чем в чистой воде (за счёт большей подвижности липидов). По-видимому, разрушение бислоя происходит в процессе дальнейшего накопления бензола между монослоями, слой которого утолщается, теряет стабильность и коллапсирует в капли, дающие начало новой фазе (сферическим мицеллам).

Известно, что барьерная функция мембран относительно пассивного транспорта ионов нарушается задолго до механического повреждения бислоя. Здесь играют роль наблюдавшиеся в наших расчётах изменения в упаковке липидов и их подвижности, приводящие к нарушению строения и нормальной работы трансмембранных ионных каналов. Аналогичный эффект предполагается при объяснении действия анестетиков на клетки ЦНС.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 15-13-00163. Вычислительные ресурсы предоставлены Межведомственным суперкомпьютерным центром РАН.

ЛОКАЛЬНЫЕ ИСКАЖЕНИЯ РЕШЁТКИ И ДЫРОЧНЫЕ ЛОВУШКИ ВОКРУГ ПРИМЕСНЫХ МОЛЕКУЛ В КРИСТАЛЛЕ АНТРАЦЕНА

Одинокоев А.В.

ЦФ РАН, Москва,

ale.odinokov@gmail.com

Проводимость в органических полупроводниках во многом определяется наличием ловушек носителей заряда. Обычно такие ловушки подразделяются на два вида: глубокие и мелкие. Первые объясняются наличием в кристалле примесных молекул, имеющих собственные локальные уровни в глубине запрещённой зоны. Вторые традиционно связываются со структурными дефектами на границах зёрен и вблизи дислокаций. Однако внедрение в кристаллическую структуру инородной молекулы также может приводить к появлению мелких ловушек, как за счёт электростатического потенциала примеси, так и за счёт искажения решётки вокруг неё.

При помощи поляризуемого поля сил, калиброванного по результатам квантово-химических расчётов, было проведено моделирование кристалла антрацена с примесными молекулами. Рассматривалось два типа примеси: обладающей дипольным моментом и не обладающей. Было найдено, что электростатический потенциал дипольной примеси создаёт в её ближайшем окружении ловушку глубиной менее 0.1, что хорошо согласуется с экспериментальными оценками. Искращения решётки также дают заметный вклад, который оценивался с помощью теории возмущений. Для квадрупольной примеси даже эта составляющая не может приводить к образованию ловушки, так как уровень энергии носителя в этом случае повышается.

Полученные результаты говорят о том, что примеси в органических полупроводниках могут служить источником ловушек, даже если их собственное сродство к носителю заряда не приводит к образованию уровня глубоко внутри запрещённой зоны. Энергия дырки вблизи квадрупольной примеси может служить оценкой величины активационного барьера для сближения реагентов при образовании C-H2 дефекта вблизи дигидропроизводных антрацена (а также других олигоаценов).

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 14-43-00052.

1. Odinokov A.V., Titov S.V., Tikhomirov V.A., Basilevsky M.V., Alfimov M.V.// Molecular Simulation. 2013. V. 39, Iss. 6. P. 442-452
2. Захарова Г.В., Константинов Р.Р., Одинокоев А.В., Чибисов А.К., Алфимов М.В., Кашеверов И.Е.// Химия высоких энергий. 2016. Т. 137, № 2. Стр. 127-131

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ИССЛЕДОВАНИИ СТРОЕНИЯ И СТАБИЛЬНОСТИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ

Одинокоев А.В.

ЦФ РАН, Москва,

ale.odinokov@gmail.com

Комплексы включения в простейшем случае представляют собой супрамолекулярные системы, состоящие из двух компонент: молекулы-«хозяина», обладающей полостью, и молекулы-«гостя», расположенной внутри этой полости. Образование комплекса осуществляется за счёт нековалентных межмолекулярных взаимодействий. Включение различных химических соединений в состав таких комплексов позволяет увеличить их растворимость, защитить от воздействия неблагоприятных внешних факторов, обеспечить стерически выгодное взаимное расположение реагентов.

В термодинамике образования комплексов включения важную роль играет конкуренция между молекулой-гостем и молекулами воды. Поэтому при компьютерном моделировании таких систем незаменимую роль играет метод молекулярной динамики, позволяющий строить большие ансамбли с участием явных молекул воды. Методология теоретического исследования комплексов включения во многом похожа на методологию исследования связывания лигандов с белками. Одной из основных задач таких исследований является оценка связывательной способности, выражаемой в виде абсолютной стандартной свободной энергии связывания, либо в виде разницы этой энергии в ряду гомологичных соединений. Одним из способов расчёта свободной энергии является метод двойной аннигиляции, когда в процессе МД расчёта взаимодействие между лигандом и окружением постепенно исчезает. Таким способом были рассчитаны константы образования комплексов включения бета-циклодекстрина с рядом органических соединений. Альтернативный подход подразумевает построение потенциала средней силы, т.е. профиля свободной энергии вдоль координаты, соответствующей разделению компонент комплекса и разведению их на бесконечность. В этом случае дополнительно можно найти различные конфигурации комплекса, их относительные энергии и высоту барьеров между ними. Такой подход применялся для исследования комплексов бета-циклодекстрина, а также комплексов включения различных кукурбитурилов.

Также большой интерес представляют комплексы включения с участием хромофорных молекул. Наличие молекулы-хозяина обеспечивает хромофорам необычное микроокружение, что сказывается на их оптических свойствах. Методом молекулярной динамики было произведено исследование строения комплексов кукурбитурилов с красителями, в которых молекулы красителя организованы в виде димеров, что согласуется с наблюдаемыми оптическими спектрами. Также были исследованы комплексы, в которых молекула красителя соседствует с молекулой триптофана. Конкуренция между различными типами комплексов даёт возможность производить детекцию триптофана и триптофан-содержащих пептидов по изменениям в спектре флуоресценции хромофорной метки. Полученные при помощи МД подробности строения этих комплексов объясняют экспериментально обнаруженное различие в действии триптофана, находящегося в середине полипептидной цепи и на её N-конце.

Работа выполнялась в рамках выполнения проектов РНФ № 15-13-00163, РФИИ 13-03-12423 офи-м2 и РФИИ № 16-03-00107 А.

1. Odinokov A.V., Titov S.V., Tikhomirov V.A., Basilevsky M.V., Alfimov M.V. // Molecular Simulation. 2013. V. 39, Iss. 6. P. 442-452
2. Захарова Г.В., Константинов Р.Р., Одинокоев А.В., Чибисов А.К., Алфимов М.В., Кашеверов И.Е. // Химия высоких энергий. 2016. Т. 137, Н. 2. Стр. 127-131

МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ С АЛЮМИНИЕВЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ

*Орехов Н.Д.^{*1,2}, Стегайлов В.В.^{1,2}*

¹МФТИ (ГУ), Москва, ²ОИВТ РАН, Москва,

**nikita.orekhov@gmail.com*

В рамках метода молекулярной динамики с волновыми пакетами исследуются процессы возбуждения алюминиевых нанокластеров, протекающие под воздействием фемтосекундных лазерных импульсов. Используемая модель межчастичного потенциала (eFF - electron Force Field [1]) позволяет описывать как поведение ионной, так и электронной подсистем. Электроны при этом представлены в виде одиночных гауссовых волновых пакетов.

Высокая, близкая к твердотельной, плотность металлических наночастиц и отсутствие механизмов быстрой диссипации энергии позволяют при фемтосекундном лазерном облучении достичь больших удельных плотностей энергии в веществе, что приводит к образованию плотной сильнонеидеальной плазмы. С практической точки зрения подобные объекты интересны в качестве источника высокоэнергетичных частиц, а также в задачах нанолитографии и нанокавитации. В работе исследуется влияния параметров импульса (длительность, энерговклад, форма импульса, его периодичность) на поведение и устойчивость металлических нанокластеров, а также эволюция неидеальной плазмы, образованной при их взрыве.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда 14-19- 01487.

1. Su J. T., Goddard III W. A. // Phys. Rev. Lett. 2007. V. 99. P.185003.

МД МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ ЭЛЕКТРОД/ЭЛЕКТРОЛИТ В Li-ВОЗДУШНЫХ СИСТЕМАХ

Павлов С.В.*, Кисленко С.А.

ОИВТ РАН, Москва,

*sergey.v.pavlov@phystech.edu

Рост использования устройств, обладающих высоким энергопотреблением, требует разработки новых аккумуляторов с повышенной удельной энергоемкостью. Среди перспективных устройств аккумулирования энергии особое место занимают Li-воздушные системы. Теоретически достижимый предел их энергоемкости составляет 1700 Вт ч/кг против 170 Вт ч/кг для наиболее востребованных сегодня Li-ионных батарей [1, 2]. Однако на практике достичь таких характеристик не удастся. Это связано, в частности, с недостаточным пониманием электродных процессов, происходящих в таких системах.

В данной работе методом классической молекулярной динамики исследовалось влияние морфологии катода на структуру межфазной границы электрод/электролит с целью оптимизации гетерогенных процессов, происходящих в Li-воздушных системах. Были рассмотрены несколько модельных катодов: графит с различной ориентацией базальных плоскостей относительно межфазной границы и нанополоска графена. В качестве растворителя был выбран ацетонитрил. Получены распределения плотности растворителя и потенциалы средней силы для иона лития и молекулы кислорода вблизи модельных катодов. Установлено качественное влияние морфологии катода на структуру межфазной границы электрод/электролит и, в частности, на распределение ионов Li^+ и молекул O_2 . Обнаружено увеличение концентрации реагентов реакции восстановления кислорода на краю графена, а также уменьшение потенциального барьера адсорбции на край графена по сравнению с адсорбцией на плоскость параллельно ориентированного графита, что может объяснять повышенное образование продуктов реакции на краях графенов при разрядке Li-воздушных батарей.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 14-50-00124 "Фундаментальные основы энергетики будущего"

1. Zheng J.P., et al. Theoretical Energy Density of Li-Air Batteries. // Journal of The Electrochemical Society. 2008
2. Girishkumar B.M., Luntz A.C., Swanson S., Wilcke W. Lithium-Air Battery: Promise and Challenges. // The Journal of Physical Chemistry Letters. 2010

МОДЕЛЬ ПАРАМАГНИТНОГО СОСТОЯНИЯ В ГЦК-ЖЕЛЕЗЕ, ИСПОЛЬЗУЕМАЯ ДЛЯ РАСЧЁТА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ УГЛЕРОДА

Ридный Я.М., Мирзоев А.А.*

ЮУрГУ, Челябинск,

*yaroslav_54@mail.ru

Сплавы железа, несмотря на развитие цветных металлов, керамик и композитов, являются основой конструктивных материалов. Для построения последовательной теории, описывающей термодинамику твёрдых растворов Fe-C, необходимы: энергия растворения углерода и энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе.

В γ -фазе в отличие от α -фазы железа, магнитные моменты атомов Fe разориентированы, что затрудняет расчёт в рамках теории функционала плотности. Поэтому для моделирования парамагнитного состояния используются различные подходы, среди которых наибольшей точностью отличается метод, используемый в работе Пономарёвой [1].

В данной работе расчёты проводились из первых принципов полнопотенциальным методом LAPW с учетом обобщенного градиентного приближения PBE-GGA в программном пакете WIEN2k [2]. В нашей модели с помощью программы BINAR [3] были получены 16 различных неэквивалентных магнитных конфигураций, из которых были выбраны 5 наименее энергетических. Потом с помощью усреднения по статистическому ансамблю вычислялись энергетические параметры. Более подробно параметры и методика расчета парамагнитного состояния обсуждаются в работе [4].

Нами получены энергетические параметры в рамках модели парамагнитного состояния, и проведено их сравнение с моделью используемой Пономарёвой [1]. Показано, лучшее согласие с экспериментальными данными, из чего был сделан вывод, о том, что наша модель наиболее пригодна для моделирования парамагнитного состояния.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №16-19-10252 и гранта РФФИ 16-03-00486 А.

1. Пономарёва А.В., Горностырёв Ю.Н., Абрикосов И.А. // Журнал экспериментальной и теоретической физики, 2015, Т. 147, С. 827.
2. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. // Computer Physics Communications, 2002, V. 147, P. 71.
3. Деянов Р.З., Еремин Н.Н., Урусов В.С., ODSS(Ordered-Disordered-Solid-Solution) Ver.1.-binar Программа расчета неупорядоченных сверхрешеток для моделирования твердых растворов замещения, Москва (2006–2007).
4. Ридный Я.М., Мирзоев А.А., Мирзаев Д.А. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика», 2014, Т. 6, № 3, С. 86.

СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В ГАЗАХ

Рудяк В.Я. , Лежнев Е.В.*

НГАСУ, Новосибирск, RU

**valery.rudyak@mail.ru*

Процессы переноса в газах и жидкостях обусловлены сложными процессами передачи по пространству энергии, импульса и массы. Информацию о соответствующих коэффициентах переноса получают главным образом экспериментально, хотя в разреженных газах это удается сделать, используя кинетическую теорию газов. Для плотных газов и жидкостей коэффициенты переноса можно моделировать методом молекулярной динамики. Однако для получения достаточной точности здесь даже в простейших случаях необходимо использовать десятки тысяч частиц, что требует очень большого времени счета. В разреженном газе для моделирования коэффициентов переноса не удается использовать метод молекулярной динамики, а применение кинетической теории также не является тривиальной задачей (необходимо умение вычислять так называемые Ω -интегралы, а для получения достаточной точности требуется реализации достаточно трудоемкой и громоздкой процедуры решения соответствующих интегральных уравнений и т.д.).

Процедуру моделирования коэффициентов переноса удалось бы существенно ускорить, если разработать метод, имитирующий динамику молекулярной системы. Тогда, используя достаточно много таких имитированных фазовых траекторий исходной молекулярной системы, можно ожидать получить удовлетворительные данные о средних ее характеристиках, какими и являются коэффициенты переноса. Цель данной работы и состоит в разработке такого имитационного метода, пригодного для моделирования процессов переноса процессов переноса в разреженных и плотных газах. Для иллюстрации в данной работе развиваемый алгоритм реализован для системы молекул в виде твердых сфер.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (грант N 14-19-00312).

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ АМОРФИЗУЮЩИХСЯ СПЛАВОВ CU-ZR

*Рыльцев Р.Е.*¹, Клумов Б.А.², Щелкачев Н.М.³, Шуняев К.Ю.¹*

¹ ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, ² ОИВТ РАН, Москва, ³ ИТФ РАН, Москва,

**aleaiil@mail.ru*

Объемоаморфные металлические сплавы вызывают интерес исследователей как в силу практической значимости, так и с фундаментальной точки зрения [1]. Одними из наиболее изучаемых систем данного типа являются сплавы Cu-Zr, обладающие уникальной для бинарных сплавов стеклообразующей способностью [2], природа которой до сих пор неясна.

Методом молекулярной динамики с использованием потенциала погруженного атома была исследована эволюция структурных свойств сплавов $\text{Cu}_x\text{Zr}_{100-x}$ ($x = 20 \dots 100$) при охлаждении с различными скоростями в интервале $\gamma = (10^{13} - 1.5 \cdot 10^9)$ К/с. Обнаружено, что уменьшение скорости охлаждения приводит к формированию более выраженной политетраэдрической структуры, в частности, к увеличению доли икосаэдрических кластеров и кластеров Франка-Каспера Z16. Показано, что предложенная недавно процедура уменьшения эффективной скорости охлаждения путем отжига системы при температурах, близких к температуре стеклования (sub-Tg annealing) [3], является некорректной при $\gamma < 10^{10}$ К/с. При охлаждении сплава $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$, соответствующего одному из объемоаморфных составов, со скоростью $1.5 \cdot 10^9$ К/с обнаружено, что в аморфной матрице образуется нанокристаллит Cu_2Zr со структурой фазы Лавеса Cu_2Mg . Данная структура изоморфна структуре другого соединения системы – Cu_5Zr . Анализ структуры указанных интерметаллидов показал, что их составляющими элементами являются многогранник Франка-Каспера Z16 и искаженный икосаэдр. Это позволяет предположить, что политетраэдрическая структура системы Cu-Zr в состоянии переохлажденной жидкости и стекла содержит кластеры указанной симметрии, которые при локальном упорядочении могут образовывать фрагменты стабильных и метастабильных кристаллических структур.

Анализ концентрационных зависимостей структурных свойств выявил их существенную немонотонность. Так, например, зависимость доли икосаэдрических кластеров имеет максимум в области $0.6 < x_{\text{Cu}} < 0.8$, соответствующей интервалу максимальной амортизирующей способности.

1. A. Inoue. // Acta Mater. 2000. V. 48. P. 279.
2. A. Inoue, W. Zhang. // Mater Trans. 2004. V. 45. P. 584.
3. Y. Zhang, C. Z. Wang, M. I. Mendeleev, F. Zhang, M. J. Kramer, K. M. Ho. // Phys. Rev. B. V. 91. P. 18020.

ПЕРЕНОС ЭНЕРГИИ МЕЖДУ СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ В ПЛАЗМЕННО-ПЫЛЕВОЙ СИСТЕМЕ

Семёнов В.П.*, Тимофеев А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

*VPSemenov@gmail.com

Явление переноса энергии между степенями свободы в плазменно-пылевой системе представляют большой интерес в области исследований пылевой плазмы [1-4]. При амплитудах колебаний, много меньших межчастичного расстояния, колебания частиц по вертикали оказывают влияние на частоту колебаний по горизонтали, подчиняющееся гармоническому закону. Так начальные стадии процесса переноса энергии могут быть описаны расширенным уравнением Матё: $\ddot{x} + 2\lambda\dot{x} + \omega_0^2(1 + h\cos\omega_p t) = \eta(t)$ [1,2], где λ — коэффициент трения, h — глубина модуляции, ω_0 — собственная частота системы, ω_p — частота параметра, а $\eta(t)$ — случайная сила с нулевым средним. В случае монослоя пылевых частиц, находящихся в приэлектродном слое газового разряда, ω_0 является собственной частотой горизонтальных колебаний и определяется, главным образом, потенциалом взаимодействия частиц и параметрической ловушкой, удерживающей частицы от разлета по горизонтали; ω_p является частотой, с которой отклонения по вертикали оказывают влияние на горизонтальные колебания, и равняется удвоенной частоте вертикальных колебаний; h показывает, насколько сильно это влияние и определяется потенциалом взаимодействия частиц и амплитудой вертикальных колебаний.

Расширенное уравнение Матё было исследовано аналитически и численно. Получены рамки применения аналитического подхода, области резонанса расширенного уравнения Матё, зависимость показателя роста энергии и параметров системы для условий, соответствующих лабораторному эксперименту. На основе полученных данных описан сдвиг областей резонанса, вызванный наличием трения в системе, и зависимость отношения частот ω_0/ω_p , при котором перенос энергии обладает наибольшей интенсивностью, от глубины модуляции h . Показано, что при достаточно больших значениях h ($h > 3$) принимают участие практически все частоты спектра колебаний пылевых частиц, а не только узкий набор кратных частот.

Предложена модель, описывающая движение пылевых частиц, образующих монослой в приэлектродном слое газового разряда. Данная модель исследована методом молекулярной динамики. Проведено сравнение результатов исследования расширенного уравнения Матё и результатов моделирования с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант №14-19-01295).

- [1] Norman G.E., Timofeev A.V. // Phys. Rev. E 84, 056401 (2011).
- [2] Semyonov V.P., Timofeev A.V. // J. Phys.: Conf. Ser. 653, 012138 (2015).
- [3] Ваулина О.С., Лисина И.И., Лисин Е.А. // ЖЭТФ 148, 819 (2015).
- [4] Vasilyak L.M., Fortov V.E., Morfill G.E. // Contrib. Plasma Phys. 51, 529 (2011).

УНИКАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ

Тимофеев А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

mail.timofeev.av@gmail.com

Пылевая плазма - ионизированный газ с заряженными частицами конденсированного вещества. В такой системе наибольший интерес вызывают свойства пылевой компоненты, особенно в условиях, когда пылевые частицы приобретают значительный заряд и их взаимодействие становится значительным. Пылевая подсистема может характеризоваться различными агрегатными состояниями - газообразным, жидким, кристаллическим, что позволяет исследовать процессы, происходящие в системе на кинетическом уровне.

Пылевые частицы в плазме газового разряда подвержены большому числу разнообразных элементарных процессов. Кроме поведения окружающей плазмы можно выделить зарядку частиц, которая приводит к флуктуациям заряда пылевых частиц и зависимости заряда от параметров окружающей плазмы, а соответственно, может зависеть от положения в пространстве относительно электрода. Сильно заряженные пылевые частицы также влияют на свойства окружающей плазмы и параметры разряда, что влияет на заряд соседних пылевых частиц. Уже эти факторы явно указывают на самосогласованность системы и на необходимость учёта коллективных эффектов, что усложняет расчёт свойств плазменно-пылевой системы. В лабораторном эксперименте часто рассматривается пылевая плазма в газовом разряде с низкой степенью ионизации, что приводит к необходимости учёта влияния нейтрального газа. Влияние нейтральных частиц на пылевую частицу можно описать добавляя стохастическую силу. К стохастическому эффекту приводят и флуктуации параметров окружающей плазмы. Немалую роль играют резонансные эффекты, которые приводят к аномально большой кинетической энергии пылевых частиц.

Принципиальная открытость и самосогласованность плазменно-пылевой системы, непостоянство заряда пылевых частиц и зависимость заряда от параметров окружения, высокая диссипативность и значительное влияние стохастических процессов, наблюдаемая самоорганизация, а также простота получения и наблюдения за системой в широком диапазоне параметров и условий делают её уникальным объектом исследования и открывают большие возможности для исследования таких сложных самосогласованных систем.

В работе рассматриваются особенности пылевой плазмы и подходов к её изучению. Модель пылевой плазмы строится с учётом флуктуаций заряда и прочих эффектов. Рассматриваются резонансные явления, аномальный разогрев пылевой компоненты, зависимость свойств пылевой плазмы от температуры в широком диапазоне значений, теплофизические свойства плазменно-пылевой системы.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-19-01295).

ПЕРЕПУТЫВАНИЕ СОСТОЯНИЙ КАК ВАЖНЕЙШИЙ ЭЛЕМЕНТ СОВРЕМЕННОЙ НАУКИ О КВАНТОВОЙ ИНФОРМАЦИИ

Федоров М.В.

ИОФ РАН, Москва,

fedorovmv@gmail.com

Перепутывание состояний – это одно из ключевых понятий современной науки о квантовой информации, впервые введенное Э. Шредингером [1] на заре создания квантовой механики. В данном докладе будут даны определения самого понятия перепутывания, а также некоторых основных характеристик степени перепутывания для квантовых двух- или трех-частичных объектов. Примерами таких систем являются электрон и ион, образующиеся при фотоионизации атома, или фрагменты молекул, образующиеся в результате фотодиссоциации, а также такой наиболее часто исследуемый объект как совокупность пар фотонов, образующихся в процессах спонтанного параметрического рассеяния света. Будут рассмотрены такие параметры степени перепутывания как параметр перепутывания Шмидта, прямо связанный с понятиями разложения и мод Шмидта [2, 3], а также параметр типа отношения ширины кривых распределений безусловных и условных плотностей вероятности, в наибольшей степени адекватный для характеристики состояний с непрерывными переменными. В качестве конкретного и наиболее интересного примера будет рассмотрен случай неколлинеарного параметрического рассеяния света, когда излучаемые фотоны распространяются вдоль конуса, и непрерывными переменными волновой функции являются сферические углы волновых векторов фотонов. В этом случае степень азимутального перепутывания оказывается очень большой [4]. Будет описана схема возможного эксперимента для частичной реализации этого огромного ресурса перепутывания. Будет сформулировано, каким образом в данном случае совокупность большого числа перепутанных фотонов может быть использована для кодирования и передачи информации.

1. Schrödinger E. // *Naturwissenschaften*, 23, 807-812; 823-828; 844-849 (1935)
2. Schmidt E. // *Math. Ann.* 63, 433-476 (1907)
3. Fedorov M.V. and Miklin N.I. // *Contemporary Physics*. 55, 94-109 (2014)
4. Fedorov M.V. // *Phys. Rev. A*, 93, 033830 (2016)

ПРОЦЕСС ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ ПРИ НАГРЕВЕ ТВЧ И РОСТ ОКСИДНЫХ НАНО- И СУБМИКРОМЕТРОВЫХ СТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ ТИТАНА

Фомин А.А.*, Родионов И.В., Фомина М.А., Кошуро В.А.

СГТУ им. Гагарина Ю.А., Саратов,

afominaalex@rambler.ru

Упрочняющая обработка токами высокой частоты (ТВЧ) металлических изделий различного назначения нашла широкое применение для улучшения их физико-механических и функциональных качеств. Большая часть исследований в данном направлении посвящена термообработке, например закалке ферромагнитных материалов (сталей), а также некоторых сплавов легких металлов (алюминия, титана) для последующей формообразующей механической обработки. Обработка ТВЧ также используется для получения износостойких покрытий на деталях машиностроения [1]. Функциональные (биосовместимые) покрытия для изделий медицинской техники, например внутрикостных имплантатов (стоматологических и ортопедических), также получают с помощью нагрева ТВЧ до температуры 600 – 1200°C и короткой высокотемпературной выдержки от 1 до 300 с [2,3].

При обработке ТВЧ решались краевые задачи электродинамики и теплопередачи методом конечных элементов (МКЭ), при этом учитывались изменения тепло- и электрофизических свойств титана в зависимости от температуры, тепловые потери на конвекцию и излучение, а также особенности геометрии системы «индуктор – изделие». Предлагаемая технология предусматривает обработку ТВЧ в частотном диапазоне от 50 до 150 кГц и силе тока на индукторе от 1 до 10 кА, при этом на равномерность процесса нагрева титановых сложнопровольных изделий оказывают влияние макрогеометрические особенности – наличие резьбовых и тонкостенных элементов.

Таким образом, определены технологические режимы обработки ТВЧ (температура $T = 800^\circ\text{C}$, выдержка не менее $t = 120$ с) для формирования оксидных наноструктурированных покрытий на цилиндрических имплантатах малого диаметра ($< 4,0$ мм), что дает возможность получить на их поверхности игольчатые нанокристаллы рутила со средним размером 50 – 60 нм и высокими показателями гетерогенности морфологии; повышенные физико-механические характеристики поверхности: твердости – $6,5 \pm 1,0$ ГПа (в 2,9 раза), модуля упругости – 330 ± 30 ГПа (в 2,8 раза), стойкости к царапанию – $4,3 \pm 0,2$ ГПа (не менее 4 раз), класса износостойкости – не ниже 6/1 (на исходном уровне титановой основы изделий); повышенные характеристики прочности и пластичности (при растяжении) основы изделия: предела прочности 570 – 640 МПа (на 52 %), предела текучести 360 – 400 МПа (на 31 %), предела упругости 200–260 МПа (на 68 %) и относительного удлинения 41-43 % (на 12 %) по сравнению с техническим титаном ВТ1-00.

Исследование выполнено по Гранту Президента РФ МД-3156.2015.8 и Стипендии Президента СП-617.2015.4.

1. В.П. Лялякин, В.Ф. Аулов, В.В. Иванайский, Н.Т. Кривочуров, А.В. Ишков, Д.В. Коваль // *Сварочное производство*. 2014. №3. С. 26.
2. A. Fomin, S. Doroszkin, M. Fomina, V. Koshuro, I. Rodionov, A. Zakharevich, N. Petrova // *Ceramics international*. 2016. V. 42. № 9. P. 10838.
3. A. Fomin, I. Rodionov // *Handbook of nanoceramic and nanocomposite coatings and materials*, Oxford, Butterworth-Heinemann. 2015. P. 403.

НЕПРЕРЫВНО-АТОМИСТИЧЕСКИЙ ПОДХОД ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ С КОНДЕНСИРОВАННЫМИ СРЕДАМИ

Шарипов З.А.^{*}, Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Христов И.Г., Христова Р.Д.

ОИЯИ, Дубна,

*zarif@jinr.ru

В работе исследуется непрерывно-атомистический подход [1,2] для моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий (ТИВЭ) с конденсированными средами. Непрерывно-атомистическая модель представляет собой два разных класса задач, а именно непрерывные уравнения теплопроводности модели термического пика [3] и уравнения движения материальных точек метода молекулярной динамики [4]. Численное решение уравнений непрерывно-атомистической модели требует разработки согласованных вычислительных схем для разных классов задач, учитывающих свойства уравнений модели. В работе для решения уравнений непрерывно-атомистической модели разработаны алгоритм и вычислительная схема с возможностью использования в многопроцессорных системах. Получены результаты исследований на примере металлических мишеней при облучении тяжелыми ионами высоких энергий.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ № 15-01-06055-а и гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ.

1. D.Ivanov and L.Zhigilei. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Physical Review B 68. 064114 (2003).
2. G.E.Norman, S.V.Starikov, V.V.Stegailov, I.M.Saitov, P.A.Zhilyaev. Atomistic modeling of warm dense matter in the two-temperature state // Contrib. Plasma Phys. 2013. V. 53. P. 129-139.
3. М.И.Каганов, И.М.Лифшиц, Л.В.Танатаров. Релаксация между электронами и решеткой // ЖЭТФ. 1956. N.31. № 2(8). С.232-237.
4. Холмуродов Х. Т. и др. Методы молекулярной динамики для моделирования физических и биологических процессов // ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 472-515.

КОНКУРЕНЦИЯ МАСШТАБОВ КАК МЕХАНИЗМ СТЕКЛОВАНИЯ И КВАЗИКРИСТАЛЛИЗАЦИИ

Щелкачев Н.М.^{*1}, Рыльцев Р.Е.², Клумов Б.А.³

¹ИТФ РАН, Москва, ²ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, ³ОИВТ РАН, Москва,

*n.chtchelkatchev@gmail.com

В последние годы было обнаружено, что многие сложные эффекты в конденсированных системах могут быть качественно объяснены наличием двух характерных масштабов в потенциале межчастичного взаимодействия. Потенциалы, обладающие таким свойством, возникают при построении эффективных взаимодействий в металлических сплавах, жидкостях с направленными связями, коллоидных системах. Было показано, что конкуренция между масштабами может приводить к полиморфизму, водоподобным аномалиям и стекольной динамике [1]. В этой связи является интересным исследование конкуренции между масштабами на процессы структурообразования и динамические свойства.

С помощью метода молекулярной динамики мы показали, что, в зависимости от соотношения между характерными межчастичными расстояниями и их эффективной концентрацией, однокомпонентная система с двухмасштабным отталкивающим потенциалом может демонстрировать различные динамические и структурные свойства при квазиравновесном охлаждении. В некоторых случаях фрустрации, обусловленные конкуренцией масштабов, подавляют кристаллизацию, и наблюдается стекольное поведение, сопровождаемое экстремально большими отклонениями температурных зависимостей транспортных свойств от закона Аррениуса [1]. В других случаях, наличие второго масштаба стабилизирует локальный икосаэдрический порядок, что приводит к переходу из жидкости в фазу декагонального квазикристалла [2]. Возможно также образование разнообразных кристаллических структур с нетривиальной для простых однокомпонентных систем симметрией. Было показано, что многие особенности поведения структурных и динамических свойств универсальны и не зависят от особенностей межчастичного потенциала.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-12-01185).

1. R. Ryltsev, N. Chtchelkatchev, V. Ryzhov // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. P. 025701.
2. R.E. Ryltsev, B.A. Klumov, N.M. Chtchelkatchev // Soft Matter. 2015. V. 11 P. 6991.

ВОЗМОЖНОСТИ ПЕРВОПРИНЦИПНОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ЖИДКИХ S-, S-P И D- МЕТАЛЛОВ, ВКЛЮЧАЯ ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Юрьев А.А.*, Гельчинский Б.Р., Вязникова Е.А.

ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург,

*yurev_anatoly@mail.ru

Для развития современных технологий необходима информация о различных свойствах веществ. Особый интерес представляют расчеты для случая экстремальных состояний вещества, где экспериментальные данные получить затруднительно или вообще невозможно. Значительные успехи в теоретическом изучении жидких металлов в последнее время связаны с методом первопринципной молекулярной динамики, предложенным Кар и Паринелло [1]. Существенный прогресс достигнут благодаря использованию суперкомпьютеров и техники параллельных вычислений. В данной работе расчеты проведены с помощью программы SIESTA [2], использующей базис атомно-подобных орбиталей, которая применялась нами ранее [3,4]. Следует отметить, что в отличие от классической молекулярной динамики, в *ab initio* подходе сразу вычисляются силы, действующие на отдельные атомы, и, таким образом, обходится проблема с построением парных потенциалов. Кроме того, уникальность используемого подхода в том, что он работает в широкой области температур и давлений, в частности для щелочных металлов плотность может отличаться в 10 и более раз, что позволяет изучать как сильно сжатые состояния, так и сверхкритические флюиды. В качестве объектов исследования выбраны жидкие металлы, относящиеся к различным группам: щелочные металлы Na и Cs, поливалентные Pb и Bi, а также переходные Cu и Ti. Построена суперячейка, содержащая 250 атомов, и рассчитана полная энергия, давление, функция радиального распределения атомов, коэффициент самодиффузии, плотность электронных состояний. Моделирование осуществлялось в широком диапазоне температур и давлений, включая экстремальные. Полученные результаты сопоставляются с опытными данными.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ИМЕТ УрО РАН, тема № 0396-2015-0080, а также при финансовой поддержке РФФИ, проект 15-03-04182, Программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект 15-7-3-15.

В работе использовался суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

Литература:

1. Car R., Parrinello M. // Phys. Rev. Letters, 55, 2471 (1985).
2. Soler J.M., Artacho E., Gale J. et. al. // J.Phys.: Cond.Matter., 14, 2745 (2002).
3. Yuryev A. A., Gelchinski B. R. // Dokl. Phys., 60, 105 (2015).
4. Yuryev A. A., Gelchinski B. R. // AIP Conference Proceedings, 1673, 020009 (2015).

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

ИМЕТ УрО РАН — Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург,
ИОФ РАН — Институт общей физики РАН, Москва,
ИПФ РАН — Институт прикладной физики РАН, Нижний Новгород,
ИТФ РАН — Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН, Москва,
МФТИ — Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный,
НГАСУ — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск,
НИЯУ МИФИ — Национальный исследовательский ядерный университет Московский инженерно-физический институт, Москва,
ННГУ — Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород,
ОИВТ РАН — Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,
ОИЯИ — Объединенный институт ядерных исследований, Дубна,
СГТУ им. Гагарина Ю.А. — Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Саратов,
ФГУП «ВНИИА» — Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики», Москва,
ЦФ РАН — Центр фотохимии РАН, Москва,
ЮУрГУ — Южно-уральский государственный университет, Челябинск

ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Введенский Николай Вадимович*, ИПФ РАН, Нижний Новгород, телефон: +7(831)4164993, факс: +7(831)4160616, vved@appl.sci-nnov.ru
2. *Губин Сергей Александрович*, телефон: +7(916)9546110, факс: +7(499)3242111, gubin_sa@mail.ru
3. *Кирова Елена Михайловна*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(926)8722257, факс: +7(926)8722257, kirova@phystech.edu
4. *Кондратюк Николай Дмитриевич*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(919)7711778, факс: +7(495)4857990, kondratyuk@phystech.edu
5. *Куриленков Юрий Константинович*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(495)4841647, факс: +7(495)4858066, kurilenkovyuri@gmail.com
6. *Ланкин Александр Валерьевич*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(903)5768208, факс: +7(495)4857990, Alex198508@yandex.ru
7. *Ленёв Дмитрий Юрьевич*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(985)1753037, факс: +7(985)1753037, lenevdy@mail.ru
8. *Мазо Михаил Абрамович*, ИХФ РАН, Москва, телефон: +7(495)9397515, факс: +7(495)1378284, mikhaile.mazo1@gmail.com
9. *Николаев Владислав Сергеевич*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(918)7632884, факс: +7(495)4859263, vladiorussia@mail.ru
10. *Норман Генри Эдгарович*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(925)0420997, факс: +7(495)4857990, genri.norman@gmail.com
11. *Одинокое Алексей Владимирович*, телефон: +7(916)8497610, факс: +7(495)9367753, ale.odinokov@gmail.com
12. *Орехов Никита Дмитриевич*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(985)1886637, факс: +7(985)1886637, nikita.orekhov@gmail.com
13. *Павлов Сергей Владимирович*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(926)6536993, факс: +7(926)6536993, sergey.v.pavlov@phystech.edu
14. *Ридный Ярослав Максимович*, ЮУрГУ, Челябинск, телефон: +7(951)4658497, факс: +7(351)2679228, yaroslav_54@mail.ru
15. *Рудяк Валерий Яковлевич*, телефон: +7(913)9137870, факс: +7(913)9137870, valery.rudyak@mail.ru
16. *Рыльцев Роман Евгеньевич*, телефон: +7(961)7676596, факс: +7(343)2679186, rrylcev@mail.ru
17. *Семёнов Владимир Павлович*, телефон: +7(495)9168829, факс: +7(495)9168829, miem@hse.ru
18. *Тимофеев Алексей Владимирович*, ОИВТ РАН, Москва, телефон: +7(495)4859263, факс: +7(495)4857990, mail.timofeev.av@gmail.com
19. *Федоров Михаил Владимирович*, ИОФ РАН, Москва, телефон: +7(915)3769335, факс: +7(499)1351140, fedorovmv@gmail.com
20. *Фомин Александр Александрович*, СГТУ им. Гагарина Ю.А., Саратов, afominalalex@rambler.ru
21. *Шарилов Зариф Алимжонович*, ОИЯИ, Дубна, телефон: +7(496)2164808, факс: +7(496)2165145, zarif@jinr.ru
22. *Щелкачев Николай Михайлович*, ИТФ РАН, Москва, телефон: +7(916)9207678, факс: +7(495)7029317, n.chelkatchev@gmail.com
23. *Юрьев Анатолий Аркадьевич*, телефон: +7(902)8717667, факс: +7(343)2678914, yurev_anatolii@mail.ru