

ОТДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИКИ, МАШИНОСТРОЕНИЯ, МЕХАНИКИ
И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ РАН
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РАН
НИУ «ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»
АДМИНИСТРАЦИЯ Г. НОВЫЙ АФОН И НОВОАФОНСКАЯ СРЕДНЯЯ ШКОЛА

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
14-й РОССИЙСКОЙ ШКОЛЫ-СИМПОЗИУМА

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО
МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

«*Foundations of Atomistic Multiscale Modeling and Simulation*»

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Фортов В.Е., сопредседатель, Президиум РАН, ОИВТ РАН, Москва
Норман Г.Э., сопредседатель, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН, Москва
Стегайлов В.В., зам. председателя, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва
Тимофеев А.В., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва
Кондратюк Н.Д., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, 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
Савинцев А.П., Кабардино-Балкарский государственный университет, Нальчик
Рудяк В.Я., Новосибирский государственный архитектурно-строительный универси-
тет (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., Администрация г. Новый Афон
Миканба А.З., Новоафонская средняя школа
Полупанова М.Л., Новоафонская средняя школа
Давыдов В.Н., Новоафонская средняя школа

Веб-сайт Симпозиума <http://ihed.ras.ru/afon17>

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

Благодарим Н. Д. Кондратюка, К. С. Фиданяна и Ленева Д. Ю. за помощь при под-
готовке сборника тезисов к изданию.

В сборнике представлены тезисы докладов 14-й Российской школы-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. 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) Методы машинного обучения в материаловедении

Программа формируется оргкомитетом тематически:

- материаловедение,
- неидеальная плазма и разогретое плотное вещество (warm dense matter),
- биоструктуры,
- межатомные потенциалы,
- научные основы нанотехнологий.

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 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,
- аспиранты,
- молодые учёные.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Бачурина О.В., Мурзаев Р.Т., Дмитриев С.В.</i> Дискретный бризер нового типа в никеле	4
<i>Вервикишко Д.Е., Школьников Е.И.</i> Роль нанопористой структуры в формирование двойного электрического слоя в суперконденсаторах с водным и органическим электролитом.	4
<i>Губаев К.В., Подрябинкин Е.В., Шапеев А.В.</i> Машинное обучение межатомных потенциалов для многокомпонентных систем	5
<i>Григорьев Ф.В., Сулимов А.В., Кондакова О.А., Сулимов В.Б., Тихонравов А.В.</i> Молекулярно-динамическое моделирование напыления тонких оптических покрытий	5
<i>Груздков А.А.</i> Релаксационная природа динамической прочности сплошных сред	6
<i>Дмитриев С.В., Корзникова Е.А., Семенов А.С., Баимова Ю.А.</i> О способах возбуждения дискретных бризеров в молекулярно-динамических расчетах	6
<i>Кондратюк Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.</i> Интегралы по траекториям с помощью молекулярной динамики	6
<i>Корзникова Е.А., Савин А.В.</i> Цепная модель углеродной наноленты	7
<i>Коробова Н.В., Крылов Н.А., Пыrkova Д.В., Ефремов Р.Г.</i> Программа для анализа структурно-динамических характеристик водородных связей в модельных биомембранах	7
<i>Кузнецов А.С., Ефремов Р.Г.</i> Белок-белковые взаимодействия в мембранах: исследование димеризации трансмембранных доменов белков методом молекулярной динамики	8
<i>Ланкин А.В.</i> Влияние ионной плотности на рекомбинацию ионов в плотных газах и жидкостях	8
<i>Ленёв Д.Ю., Норман Г.Э.</i> Рост кластеров атомов железа и термическая аккомодация атомов инертных газов на них	9
<i>Ломачук Ю. В., Скрипников Л. В., Демидов Ю. А., Мосягин Н.С., Зайцевский А. В., Семенов С. Г., Титов А. В.</i> Расчеты химических сдвигов рентгеновских эмиссионных спектров ниобия в молекулярных кластерах относительно металла.	9
<i>Николаев С.В., Кузьмин В.И., Овчинников С.Г.</i> Исследование спектральных свойств ферми- и бозе-частиц на двумерной решётке в рамках кластерной теории возмущений	10
<i>Новиков И.С., Шапеев А.В.</i> Применение машинно обучаемых межатомных потенциалов для исследования оксидных и катодных материалов	10
<i>Норман Г.Э., Саитов И.М.</i> Фазовая диаграмма водорода при высоких давлениях	11
<i>Норман Г.Э., Саитов И.М., Сартан Р.А.</i> Фазовый переход флюид-флюид в разогретом плотном водороде	11
<i>Овчинников С.Г., Гавричков В.А., Полукеев С.И.</i> Расчет обменного взаимодействия в диэлектриках мотгхаббарда с учетом возбужденных состояний при оптической накачке.	11
<i>Орлов Ю.С., Николаев С.В., Нестеров А.И., Овчинников С.Г.</i> Магнитные и структурные фазовые переходы в системах со спиновым кроссовером под давлением	12
<i>Подрябинкин Е.В., Шапеев А.В.</i> Активное обучение межатомных потенциалов	12
<i>Покаташкин П.А., Коротаев П.Ю., Янцкин А.В.</i> Аморфизация в боре молекулярно-динамическое исследование	13
<i>Рудяк В.Я.</i> Механизмы процессов переноса в наножидкостях в связи с проблемами многомасштабного моделирования	13
<i>Рысаева Л.Х., Баимова Ю.А., Лисовенко Д.С.</i> Деформационное поведение объемных углеродных наноматериалов на основе листов графена, нанотрубок и фуллереноподобных молекул	14
<i>Стегайлов В.В.</i> Атомистическое моделирование и развитие суперкомпьютеров	14
<i>Титов А.В., Шахова В.М., Ломачук Ю.В., Мальцев Д.А., Скрипников Л.В., Мосягин Н.С., Петров А.Н., Демидов Ю.А., Семенов С.Г., Зайцевский А.В.</i> Эффективные состояния атомов в материалах: теоретические методы и расчеты химических сдвигов рентгеноэмиссионных спектров nb в ниобатах и ub во фторидах	15
<i>Томилин Ф.Н., Овчинников С.Г.</i> Квантово-химические подходы при изучении биологически активных систем	15
<i>Федоров А.С., Высотин М.А., Томилин Ф.Н.</i> Новый метод расчета кинетической стабильности молекул и наноструктур при высоких температурах	16
<i>Фиданьян К.С., Стегайлов В.В.</i> Расчет коэффициента диффузии вакансий: за пределами точности метода neb	16
<i>Филиппов А.В.</i> Потенциал взаимодействия заряженных микрочастиц в неравновесной плазме	17
<i>Цымбалов Е.А., Шапеев А.В.</i> Машинное обучение для аппроксимации электронных зон si	17
<i>Чугунов А.О., Ефремов Р.Г.</i> Развитие идей многомасштабного моделирования биомолекул в методе белковой топографии	18
<i>Шапеев А.В., Подрябинкин Е.В., Губаев К.В., Новиков И.С.</i> Применение машинного обучения для построения межатомных потенциалов	18
<i>Шарипов З.А., Батгээрэл Б., Купенова Т.Н., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Христов И.Г., Христова Р.Д.</i> Моделирование тепловых эффектов и структурных изменений в металлах, облучаемых нанокластерами меди	19
<i>Шахова В.М., Ломачук Ю.В., Демидов Ю.А., Мосягин Н.С., Скрипников Л.В., Зайцевский А.В., Титов А.В.</i> Моделирование кластеров для кристаллов ubf_2 , ubf_3 и расчет химических сдвигов рентгеновских эмиссионных спектров для иттербия	19
<i>Щелкачев Н.М., Рывльцев Р.Е.</i> Особенности корреляционных функций, мягкие моды и локальная структура неупорядоченных конденсированных систем	19
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	20
ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ	21

ДИСКРЕТНЫЙ БРИЗЕР НОВОГО ТИПА В НИКЕЛЕ

*Бачурина О.В.^{*1}, Мурзаев Р.Т.², Дмитриев С.В.²*

¹ УГНТУ, Уфа, RU, ² ИПСПМ РАН, Уфа, RU

**obachurina@yahoo.com*

Локализованные колебания на однородных решетках представляют особый интерес для физических свойств кристаллов. Они получили название “дискретных бризеров”. В настоящее время их исследованию посвящено большое количество работ [1]–[5]. Отметим, что все исследованные до настоящего времени в научной литературе дискретные бризеры носили линейный характер, в то время как о существовании и свойствах нелинейных колебательных мод, локализованных в пределах одной плоскости, до сих пор речи не велось. Настоящая работа посвящена изучению такого дискретного бризера нового типа.

Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием пакета программ LAMMPS [6]. Для описания межатомного взаимодействия в никеле был взят многочастичный потенциал, построенный на основе метода погруженного атома [7].

В качестве первого шага, в работе была рассмотрена делокализованная плоская колебательная мода в ГЦК решетке никеля вдоль наиболее плотноупакованной плоскости [111]. Было установлено, что колебательная мода имеет жесткий тип нелинейности, при котором частота увеличивается с ростом амплитуды. При этом наибольшее время жизни нелинейной моды составляет 17 ps при начальной амплитуде 0.175 Å. Основываясь на полученных в работе результатах, было сделано предположение о возможности существования плоского бризера в никеле.

Далее, плоский бризер в никеле действительно был найден. Оказалось, что данная локализованная мода «живет» более 20 колебаний и после распадается на два линейных дискретных бризера. Затем один из них затухает, а другой при этом живет еще довольно значительное время.

Таким образом, на основании проведенных исследований при помощи методов молекулярной динамики была показана возможность существования дискретного бризера нового типа, так называемого “плоского” бризера, в ГЦК решетке никеля.

1. С.В. Дмитриев, Е. А. Корзникова, Ю. А. Баимова и др. УФН 186, 471 (2016)
2. С.В. Дмитриев, Л.З. Хадеева, ФТТ, 53(7), 1353 (2011)
3. Korznikova E.A., Bachurin D.V., Fomin S.Yu, et al. Eur. Phys. J. B (2017), 90, 23
4. G. Chechin, D. Ryabov, S. Shcherbinin. Letters on Materials Vol. 6, No. 1, 9–15 (2016)
5. I.P. Lobzenko, G.M. Chechin, G.S. Bezuglova et al, Phys. Solid State 58, 633 (2016)
6. <http://lammps.sandia.gov/>
7. Foiles, S. M., Baskes, M. I. and Daw, M. S., Phys. Rev. B, 33, 7983, (1986)

РОЛЬ НАНОПОРИСТОЙ СТРУКТУРЫ В ФОРМИРОВАНИЕ ДВОЙНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СЛОЯ В СУПЕРКОНДЕНСАТОРАХ С ВОДНЫМ И ОРГАНИЧЕСКИМ ЭЛЕКТРОЛИТОМ.

Вервикишко Д.Е.^{}, Школьников Е.И.*

ОИВТ РАН, Москва, RU

**vitkina-darya@yandex.ru*

Электрохимические двойнослойные суперконденсаторы представляют собой интенсивно развивающуюся технологию хранения энергии, широко востребованную в нишах, связанных с электрическим или гибридным транспортом, в системах на основе возобновляемых источников энергии, в традиционной энергетике для сглаживания пиковых нагрузок в сети и подавления флуктуаций на дизель-генераторных установках и др.

Процессы, происходящие в двойном электрическом слое (ДЭС) на границе раздела двух проводников, близки тем, которые протекают в обычном конденсаторе, однако в этом случае расстояние между несущими различный заряд обкладками составляет несколько межатомных длин. Фактически, одна обкладка представлена электронами в электронном проводнике, а вторая – сорбированными на поверхности электронного проводника положительными ионами электролита. На втором электроде слой формируется за счет обеднения электронами электронного проводника и сорбции отрицательных ионов электролита. Таким образом, для достижения максимальной емкости необходимо обеспечить как можно большую поверхность контакта электролита с электронным проводником.

Режимы разряда и заряда суперконденсатора во многом определяют его мощность и энергоемкость. Разряд большими токами повышает мощность, однако значительная часть энергии при этом либо теряется на сопротивлениях электролита и электродов, либо двойной слой не успевает разрядиться до конца. Для систем с водным электролитом удельная энергоемкость существенно ниже, чем для органического электролита. Более высокое значение удельной энергоемкости у систем на основе органических электролитов достигается преимущественно за счет высокого рабочего напряжения, однако сопротивление таких электролитов существенно выше (что существенно понижает их КПД на больших токах и приводит к значительному разогреву). В то же время для органических систем удельная энергоемкость приближается к таковой для свинцово-кислотных аккумуляторов и проточных ванадиевых редокс-батареи, что вместе с высокими ресурсными показателями и повышенной глубиной разряда повышает конкурентоспособность таких суперконденсаторов.

Данная работа освещает большой цикл исследований активированных углей разного генезиса в составе электродов суперконденсаторов, проведенных с целью получения высоких удельных электрохимических характеристик данных устройств. Для активированных углей на основе древесины было показано, что при повышении температуры активации и/или увеличении количества активатора реализуется ситуация, при которой внутри частиц угля вблизи их поверхности образуется избыточное количество пор, а мелкие частицы образуют плохо диспергируемые агрегаты. Это приводит к тому, что в этих порах и агрегатах сосредоточен избыточный объем электролита. Кроме того, в приповерхностном слое частиц с ростом объема микропор стенки этих пор становятся тоньше. Это негативно сказывается на эффективности образования ДЭС в микропорах внутри частиц угля вследствие ограничений по твердой фазе. Этот вывод согласуется с результатами атомистического моделирования [1], в соответствии с которыми преобладающее влияние на емкость системы оказывает распределение потенциала в углеродном материале по сравнению с его распределением в водном электролите. Следует отметить, что вклад сопротивления твердой

фазы во внутреннее сопротивление СК для электролитов с высокой и низкой ионной проводимостью различных. Для водного электролита с высокой ионной проводимостью он более существенный, чем для органического электролита.

1. Ланкин А.В., Норман Г.Э., Стегайлов В.В. Атомистическое моделирование взаимодействия электролита с графитовыми наноструктурами в перспективных суперконденсаторах // Теплофизика Высоких Температур. 2010. Т.48. №6. С.877 – 885.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СИСТЕМ

Губаев К.В. , Подрябинкин Е.В., Шапеев А.В.*

Сколтех, Москва, RU

**konstantin.gubaev@skoltech.ru*

В настоящее время имеется интерес к атомистическому моделированию таких систем, как высокоэнтропийные металлические сплавы [1-4] и органические молекулы [5]. Проведение численных экспериментов на основе квантово-механических расчетов зачастую требует чрезвычайно больших затрат вычислительного времени, в связи с этим особую ценность представляют машинно-обучаемые модели, способные достаточно точно предсказывать искомые свойства многокомпонентных систем после тренировки на некотором количестве квантово-механических данных.

В работе предлагается модель, обобщающая межатомные потенциалы [6] на случай нескольких компонент. Данная модель является обобщением модели погруженного атома ЕАМ, зарекомендовавшей себя во многих задачах атомистического моделирования [7-9], а также является систематически улучшаемой, т.е. позволяющей регулировать соотношение точности и вычислительной скорости.

Представлены результаты расчета данной моделью выпуклых оболочек CuPd и CoNbV систем, фононного спектра AgPd сплава, а также свойств органических молекул [5] в сравнении с другими моделями, представленными в литературе [10-11]. Продемонстрирована применимость предложенной модели к широкому классу задач атомистических расчетов. Также описывается используемый в работе метод активного обучения, который позволяет значительно сократить количество квантово-механических расчетов, необходимых для обучения модели межатомного взаимодействия.

1. Nohring W. G., Curtin W. A. Thermodynamic properties of average-atom interatomic potentials for alloys //Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2016. – Т. 24. – №. 4. – С. 045017
2. Nyshadham C. et al. A computational high-throughput search for new ternary superalloys //Acta Materialia. – 2017. – Т. 122. – С. 438-447.
3. Zhang J. C. et al. Ab initio molecular dynamics study of the local atomic structures in monatomic metallic liquid and glass //Materials and Design. – 2015. – Т. 77. – С. 1-5.
4. Trady S. et al. Molecular dynamics study of atomic-level structure in monatomic metallic glass //Journal of Non-Crystalline Solids. – 2016. – Т. 443. – С. 136-142. MLA
5. Ramakrishnan R. et al. Quantum chemistry structures and properties of 134 kilo molecules //Scientific data. – 2014. – Т. 1.
6. Shapeev A. V. Moment Tensor Potentials: a class of systematically improvable interatomic potentials //Multiscale Modeling and Simulation. – 2016. – Т. 14. – №. 3. – С. 1153-1173.
7. Kim H. K., Jung W. S., Lee B. J. Modified embedded-atom method interatomic potentials for the Nb-C, Nb-N, Fe-Nb-C, and Fe-Nb-N systems //Journal of Materials Research. – 2010. – Т. 25. – №. 07. – С. 1288-1297.
8. Jelinek B. et al. Modified embedded atom method potential for Al, Si, Mg, Cu, and Fe alloys //Physical Review B. – 2012. – Т. 85. – №. 24. – С. 245102.
9. Zhou L. G., Huang H. Response embedded atom method of interatomic potentials //Physical Review B. – 2013. – Т. 87. – №. 4. – С. 045431.
10. Ramakrishnan R. et al. Big data meets quantum chemistry approximations: the δ -machine learning approach //Journal of chemical theory and computation. – 2015. – Т. 11. – №. 5. – С. 2087-2096.
11. Schutt K. T. et al. Quantum-chemical insights from deep tensor neural networks //Nature communications. – 2017. – Т. 8. – С. 13890.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАПЫЛЕНИЯ ТОНКИХ ОПТИЧЕСКИХ ПОКРЫТИЙ

Григорьев Ф.В. , Сулимов А.В., Кондакова О.А., Сулимов В.Б., Тихонравов А.В.*

НИВЦ МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, RU

**fedor.grigoriev@gmail.com*

Оптические и структурные свойства напыляемых оптических покрытий существенно зависят от технологических параметров процесса напыления (температура подложки, энергия и угловое распределение по скоростям осаждаемых атомов, давление и состав газа в вакуумной камере и т.д.) [1]. Экспериментальное исследование указанной зависимости затруднено в силу малой толщины и неупорядоченной структуры покрытия, в связи с чем использование для этой цели суперкомпьютерного моделирования представляется перспективным.

В работе представлена атомистическая модель процесса напыления тонких оптических покрытий диоксида кремния, позволяющая моделировать физико-химические процессы, сопровождающие рост пленки [2]. Метод основан на классической молекулярной динамике (МД) с оригинальным силовым полем DESII, обладающим высокой численной эффективностью и позволяющим описать структурные свойства стеклообразного и кристаллического диоксида кремния. Разработанная модель предназначена для использования на суперкомпьютерах с количеством вычислительных узлов до нескольких тысяч.

В рамках развитого подхода впервые проведено атомистическое моделирование тонких пленок диоксида кремния толщиной до 100 нм, что близко к технологической толщине одного слоя тонкого покрытия. Исследованы структурные параметры пленки (плотность, длины связи, валентные углы, концентрация точечных дефектов, концентрация и распределение по размерам пор, поверхностная шероховатость, статистика колец с различным числом атомов) в зависимости от параметров напыления. Рассчитаны напряжения в напыленной пленке, изучено влияние отжига на структурные свойства напыленной пленки [3,4]. Предсказанное превышение показателя преломления пленки SiO₂ над показателем преломления кварцевого стекла подтверждено экспериментально для пленок, полученных методом реактивного ионно-лучевого распыления с ионным ассистированием.

1. Piegari A. and Flory F. Optical Thin Films and Coatings. Cambridge: Woodhead Publishing. 2013.
2. Grigoriev F. V., Sulimov A. V., Kochikov I. V., Kondakova O. A., Sulimov V. B. // Int. J. of High Perf. Comp. Appl. 2015. V.29. P.184.
3. Grigoriev F.V., Katkova E.V., Sulimov A.V., Sulimov V.B. and Tikhonravov A.V. // Optical Materials Express. 2017. V.6. P.3960.
4. Grigoriev F. V., Sulimov A. V., Kochikov I. V., Kondakova O. A., Sulimov V. B., Tikhonravov A. V. // Applied Optics. 2017. V.56. P.C87.

РЕЛАКСАЦИОННАЯ ПРИРОДА ДИНАМИЧЕСКОЙ ПРОЧНОСТИ СПЛОШНЫХ СРЕД

Груздков А.А.

*СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, RU
gruzdkov@mail.ru*

Расчет динамики конструкций и оптимизация ряда технологических процессов требуют корректного учета свойств материалов при интенсивных воздействиях малой длительности. Традиционные модели, используемые в широко распространенных пакетах компьютерных программ, основаны на представлениях о существовании скоростной зависимости прочности, т. е. рассмотрении критической нагрузки как функции скорости нагружения. Многочисленные экспериментальные данные показывают ограниченность данного подхода и принципиальную невозможность в его рамках моделировать некоторые особенности динамического поведения сплошных сред.

Более универсальным и адекватным представляется другой подход. При резком изменении параметров внешнего воздействия состояние материала не может рассматриваться как равновесное. Переход в новое состояние определяется характерной скоростью релаксационных процессов, протекающих в материале. Процесс разрушения, таким образом, можно рассматривать как разновидность фазовых переходов.

Вариантом данного подхода являются модели, основанные на концепции инкубационного времени, в которых в явном виде в качестве параметра вводится характерное время релаксации. Достоинством данных моделей является отсутствие привязки к конкретному типу нагружения и возможность установления связей с моделированием поведения материалов на микро-уровне.

О СПОСОБАХ ВОЗБУЖДЕНИЯ ДИСКРЕТНЫХ БРИЗЕРОВ В МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ РАСЧЕТАХ

*Дмитриев С.В.^{*1}, Корзникова Е.А.¹, Семенов А.С.², Баимова Ю.А.¹*

¹ИПСПМ РАН, Уфа, RU, ²СВФУ, Мирный, RU

**dmitriev.sergey.v@gmail.com*

Дискретные бризеры (ДБ) в кристаллах – это локализованные на группе атомов колебательные моды большой амплитуды. В ряде случаев степень пространственной локализации ДБ очень высока, так что большую амплитуду колебаний имеет один атом, как в случае ионного кристалла NaI или пара атомов, как, например, в однородно деформированном графене или нитриде бора. В этих случаях возбуждение ДБ в молекулярно-динамических расчетах не вызывает затруднения, достаточно задать начальные смещения атомам, имеющим большие амплитуды колебаний, при нулевых начальных скоростях всех атомов. После непродолжительного переходного процесса (несколько периодов колебаний) часть энергии, переданной кристаллу в нулевой момент рассеется в виде малоамплитудных тепловых колебаний и возникнет устойчивая долгоживущая колебательная мода, представляющая собой ДБ. Однако в других случаях ДБ локализован на десятке атомов и тогда его возбуждение может оказаться нетривиальной задачей. В докладе будут представлены подходы к решению данной задачи.

ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кондратьев Н.Д., Норман Г.Э., Стегайлов В.В.

*НИУ ВШЭ, Москва, RU
nidkond@gmail.com*

Учет квантовых свойств ядер в модели может играть ключевую роль в предсказании уравнения состояния и транспортных свойств вещества. Примерами подобных систем являются вода и жидкий водород при низких температурах. В данных случаях поведение атомов водорода имеет квантовый характер и не может быть описано средствами классической молекулярной динамики [1-3]. Авторы данной работы также встретили ряд сложностей с воспроизведением свойств жидких углеводородов [4-6].

Метод интегралов по траекториям, основанный на идеях Фейнмана, позволяет учесть квантовую природу ядер в модели. В докладе будут рассмотрены основные подходы, используемые для моделирования квантовых свойств подобных систем, а также представлены первые результаты по верификации реализации в программном пакете LAMMPS на примере жидкой воды. В работе рассчитаны квантовые радиальные функции распределения и представлена зависимость термодинамических свойств от детализации квантовой модели. Также проведено сравнение с результатами, полученными с использованием программного пакета i-PI.

Исследование финансировалось в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

1. M. Tuckerman Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation (2010)
2. S. Habershon, D. Manolopoulos, T. Markland, T. Miller Annu. Rev. Phys. Chem. **64**, 387–413 (2013)
3. M. Ceriotti et. al, Chem. Rev. **116**(13), 7529–7550 (2016)
4. N. Kondratyuk, G. Norman, V. Stegailov J. Chem. Phys. **145**, 204504 (2016)
5. N. Kondratyuk, G. Norman, V. Stegailov Polym. Sci. Ser. A. **58**(5), 519–531(2016)
6. N. Kondratyuk, G. Norman, V. Stegailov J. Phys. Conf. Ser. **774**, 012039 (2016)

ЦЕПНАЯ МОДЕЛЬ УГЛЕРОДНОЙ НАНОЛЕНТЫ

*Корзникова Е.А.*¹, Савин А.В.²*

¹ИПСПМ РАН, Уфа, RU, ²ИФХ РАН, Москва, RU

*elena.a.korznikova@gmail.com

Графен, как и большинство материалов малой размерности обладает очень малой изгибной жесткостью по сравнению с его свойствами в плоскости листа и может образовывать различные конформации стабильность которых обеспечивается наличием сил ван дер Ваальса. Исследование различных объёмных конфигураций двумерных углеродных sp^2 структур является весьма актуальным направлением современной науки о материалах. Однако моделирование значительных по размеру объектов является весьма затратными по времени и машинным ресурсам объектов. Для оптимизации процесса моделирования нами была предложена простейшая модель молекулярной цепи на плоскости, позволяющая описать складчатые и рулонные упаковки углеродных нанолент. Модель учитывает изгибную и продольную жесткость листа графена, а также слабые ван-дер Ваальсовские взаимодействия описываемые потенциалом Леннарда Джонса. Была проделана работа по верификации модели путем сравнения результатов с результатами полноатомного моделирования. С использованием модели получены возможные стационарные состояния рулонна изолированной однослойной наноленты и рулонной обмотки нанотрубки. Получена зависимость частоты самого низкочастотного собственного колебания рулона (скручивание-раскручивание рулона) от длины наноленты. Промоделированы рулонные упаковки двух и трехслойный нанолент. Показана устойчивость рулонных упаковок к тепловым колебаниям и рассмотрены их возможные конформационные изменения. В рамках полноатомной модели рулона найден плотность частотного спектра тепловых колебаний рулона. Показано, что плотность частотного спектра рулона отличается от плотности частотного спектра плоской наноленты только в области низких и высоких частот. Обсуждается расширение возможностей цепной модели для описания многослойных нанолент, комбинации нескольких нанолент и нанотрубок графена и другие варианты развития модели.

ПРОГРАММА ДЛЯ АНАЛИЗА СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В МОДЕЛЬНЫХ БИОМЕМБРАНАХ

*Корова Н.В.*¹, Крылов Н.А.¹, Пыркова Д.В.², Ефремов Р.Г.¹*

¹НИУ ВШЭ, Москва, RU, ²ИБХ РАН, Москва, RU

*nvkorobova_1@edu.hse.ru

Цель: в Лаборатории моделирования бимолекулярных систем ИБХ РАН разрабатывается система сопровождения вычислительного эксперимента, основанного на методе молекулярной динамики (МД). Цель настоящей работы заключается в создании программного модуля этой системы, предназначенного для количественной характеристики водородных связей в модельных биомембранах - гидратированных липидных бислоях; исследовании структурно-динамических характеристик водородных связей; изучении влияния водородных связей на структурную организацию мембраны. Исследование водородных связей актуально, поскольку на сегодняшний день многие свойства водородных связей и их влияние на структуру и поведение мембраны не исследованы.

Материалы и методы: работа по созданию программного модуля велась на языке программирования Python. Для работы с многомерными массивами были задействованы возможности библиотеки NumPy. Указанный модуль работает по следующей схеме: на вход подается информация о водородных связях для указанной биологической системы: список атомов, между которыми образовалась связь, и ее геометрическое положение. Результатом работы модуля является формирование файлов, содержащих данные о времени жизни каждой водородной связи; атомах, образующих долгоживущую водородную связь; времени существования непрерывных водородных связей между атомами/молекулами; среднем числе связей, приходящихся на одну молекулу липида; молекулах воды, которые образуют несколько водородных связей с разными молекулами липидов, так называемых «водяных мостиках». Помимо количественных характеристик, программное обеспечение предоставляет возможность оценить распределение водородных связей визуалью. С помощью созданной программы были построены карты водородных связей для ряда липидных бислоев различного состава.

Результаты: При помощи вышеупомянутого пакета программ было произведено картирование липидных бислоев, состоящих из молекул диолеилфосфатидилхолина (ДОФХ) и диолеилфосфатидилсерина (ДОФС). Картирование производили для следующих параметров: плотности распределения межлипидных водородных связей; времени жизни межлипидных водородных связей; среднего числа молекул липидов, образующих геометрические кластеры. Из полученных данных сделан вывод, что чем выше плотность водородных связей на участке поверхности мембраны, тем более вероятно образование в этом месте геометрического кластера и тем больше время жизни таких связей. И, наоборот, в местах с низкой плотностью водородных связей образование геометрических кластеров маловероятно, и при этом такие связи являются короткоживущими.

Выводы: Создана программа, предназначенная для численного анализа водородных связей в модельных липидных бислоях, имитирующих клеточную мембрану. Выявлено, что при высокой плотности водородных связей среднее время их существования возрастает, среднее число молекул липидов, образующих геометрические кластеры, также увеличивается. Созданы базы данных моделируемых систем, получаемых в расчётах МД.

Исследование финансировалось в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

1. Pyrkova D.V. et. al. Dynamic clustering of lipids in hydrated two-component membranes: results of computer. // Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. 2012. V. 31. P. 87-95.
2. Boggs J. Lipid intermolecular hydrogen bonding: influence on structural organization and membrane function. // Biochimica et Biophysica Acta. 1987. V. 906. P. 353-404.
3. Rossum G. Python tutorial. Centrum voor Wiskunde en Informatica (CWI). Amsterdam, 1995. P. 1-65.

БЕЛОК-БЕЛКОВЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МЕМБРАНАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ ДИМЕРИЗАЦИИ ТРАНСМЕМБРАННЫХ ДОМЕНОВ БЕЛКОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Кузнецов А.С. , Ефремов Р.Г.*

НИУ ВШЭ, Москва, RU

**akuznecov@hse.ru*

Димеризация трансмембранных α -спиральных доменов белков в плазматической мембране клетки представляет собой фундаментальный механизм белок-белковых взаимодействий. Этот процесс лежит в основе функционирования жизненно важных молекул - рецепторных тирозинкиназ, ионных каналов и других мембранных белков. В то же время, молекулярный механизм работы большинства таких систем до сих пор не полностью изучен. В частности, не до конца ясна роль липидного окружения, которое в ряде случаев может модулировать активность встроенных в мембрану белков [1]. В свою очередь, белки могут специфически взаимодействовать с липидами и вызывать формирование в мембране областей с особыми свойствами [2].

В настоящей работе с помощью метода молекулярной динамики проведён компьютерный анализ структурно-динамических параметров ряда трансмембранных (ТМ) α -спиральных сегментов белков, встроенных в гидратированный липидный бислой, являющийся моделью мембраны. В качестве объектов исследования выбраны природные мономеры и димеры ТМ α -спиралей и несколько искусственно сконструированных пептидов. Установлено, что в липидном окружении все типы ТМ-спиралей в целом сохраняют свою структуру, причем наблюдается взаимная адаптация пептидов и мембранной среды. Показано, что для каждого типа ТМ-доменов некоторые локальные параметры их пространственной структуры меняются в зависимости от свойств водно-липидного окружения. Наблюдался также изменение как локальных (вблизи пептида), так и интегральных макроскопических параметров липидного бислоя при встраивании мономеров и димеров исследуемых пептидов [3]. Для димеров ТМ α -спиралей показано, что релаксация в ходе динамики приводит к взаимной подстройке структуры белка и липидного окружения. При этом природные димеры наилучшим образом адаптированы для существования в мембранном окружении в плотно упакованном (димеризованном) состоянии. Тем не менее, для искусственных пептидов также наблюдали значительный энтропийный вклад мембраны в их взаимодействие. Полученные результаты позволяют говорить об активной роли мембранного окружения в процессе белок-белковых взаимодействий.

Исследование финансировалось в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

1. Poveda J.A. et al. // Biochim. Biophys. Acta. 2014. V.1838. N.6. P.1560-1567.
2. Flinner N., Schleiff E. // PLoS ONE. 2015. V.10. N.7. P.e0133999.
3. Kuznetsov A.S., Polyansky A.A., Fleck M., Volynsky P.E., Efremov R.G. // J. Chem. Theory. Comput. 2015. V.11. N.9. P.4415-4426.

ВЛИЯНИЕ ИОННОЙ ПЛОТНОСТИ НА РЕКОМБИНАЦИЮ ИОНОВ В ПЛОТНЫХ ГАЗАХ И ЖИДКОСТЯХ

Ланкин А.В.

ОИВТ РАН, Москва, RU

Alex198508@yandex.ru

В работе рассмотрен процесс рекомбинации ионов в плотных газах и жидкостях при различных вариантах выбора свойств среды и самого иона. Установлена зависимость константы скорости рекомбинации в газе от концентрации фонового газа при её отсутствие в жидкостях. Получены условия для положения областей с различными режимами кинетики рекомбинации.

Произведено исследование зависимости константы скорости рекомбинации в плотных газах от параметра кулоновской неидеальности. Установлено, что вопреки имеющим место в литературе представлениям об отсутствии зависимости скорости рекомбинации в диффузионном режиме от параметра кулоновской неидеальности [1] в действительности такая зависимость сохраняется. Данная зависимость может быть интерполирована в диапазоне всех значений параметра неидеальности экспоненциально спадающей кривой. Крутизна уменьшения константы скорости рекомбинации с ростом параметра неидеальности уменьшается с увеличением концентрации фонового газа. При этом при рекомбинации ионов в жидкостях подобной зависимости константы скорости рекомбинации от ионной плотности не обнаруживается. Кроме того изучена зависимость константы скорости рекомбинации от соотношения масс рекомбинирующих ионов, а также нейтральных молекул и ионов. Получены интерполяционные формулы, позволяющие вычислять значения константы скорости рекомбинации ионов в различных несобственных газах и их смесях в широком диапазоне значений температур и концентраций ионов.

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

1. Bates D.K. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1982. T. 15. P. L119.

РОСТ КЛАСТЕРОВ АТОМОВ ЖЕЛЕЗА И ТЕРМИЧЕСКАЯ АККОМОДАЦИЯ АТОМОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ НА НИХ

Ленёв Д.Ю.*¹, Норман Г.Э.²

¹ОИВТ РАН, Москва, RU, ²НИУ ВШЭ, Москва, RU

*lenevdy@mail.ru

Методом молекулярной динамики изучалось взаимодействие уединенного кластера железа с единичным налетающим атомом в вакууме. Происходит расчет траекторий налетающих атомов железа и инертных газов. Данное исследование посвящено таким важным с точки зрения роста наночастиц величинам, как коэффициенты прилипания и термической аккомодации.

Коэффициент прилипания определяется через принадлежность налетающего атома к кластеру. Чтобы это определить, введены геометрическое, временное и энергетическое условия. Выполнение геометрического показывает, что атом находится в зоне действия потенциала кластера. Временного - что атом находится там на порядок больше, чем требуется для единичного соударения. Энергетическое требует, чтобы энергия атома стала отрицательной. Поскольку изначально атом находится вне зоны действия межатомного потенциала кластера и обладает кинетической энергией, его энергия положительная.

Коэффициент термической аккомодации определяется по формуле:

$$\beta = m(v_i^2 - v_o^2)/4k(T - T_{cl}), \quad (1)$$

где β - коэффициент термической аккомодации, m - масса налетающего атома, v_i и v_o - начальная и конечная скорости налетающего атома, k - константа Больцмана, T и T_{cl} - температуры налетающего атома и кластера соответственно. Коэффициент термической аккомодации - величина, характеризующая эффективность теплообмена между налетающим атомом и кластером. Также приведены расчеты величины, представляющей из себя коэффициент термической аккомодации, домноженный на знаменатель. Это количество тепла, передаваемого при взаимодействии налетающим атомом кластеру, то есть теплообмен.

Кластер имеет псевдосферическую форму, а его атомы скорости, соответствующие распределению Максвелла для заданной температуры. Для налетающего атома задается прицельный параметр - минимальное расстояние, на котором атом пролетит от центра масс кластера при условии отсутствия взаимодействия с его атомами, и начальную скорость. Она выбирается случайно из распределения Максвелла для некоторой температуры.

На основании зависимостей обоих коэффициентов от прицельного параметра были получены зависимости их от температур кластера в диапазоне от 200 до 2500 К и налетающего атома от 300 до 5000 К. Зависимости оказались убывающими, в отличие от таковой для теплообмена. Была найдена взаимосвязь между временем взаимодействия между кластером и налетающим атомом и коэффициентом термической аккомодации.

Зависимость от размера кластера была рассчитана от 9 до 1243 атомов. В случае коэффициента термической аккомодации зависимость оказалась ближе к прямой для $N^{-1/3}$. В случае коэффициента прилипания зависимость достаточно слабая. Сделаны единичные измерения коэффициента термической аккомодации для гелия и ксенона, в то время как большая часть его расчетов проведена для аргона. Получено предварительное совпадение с экспериментом. Требуется дополнительный расчет из-за особенностей эксперимента: точная температура кластеров неизвестна, присутствует инертный газ, который выполняет функцию охлаждения. Нужно рассчитать его точное влияние.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 17-79-20391.

РАСЧЕТЫ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ НИОБИЯ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КЛАСТЕРАХ ОТНОСИТЕЛЬНО МЕТАЛЛА.

Ломачук Ю. В.*, Скрипников Л. В., Демидов Ю. А., Мосягин Н. С., Зайцевский А. В., Семенов С. Г., Титов А. В.

НИЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, RU

*jeral2007@gmail.com

Возможности рентгеновской эмиссионной спектроскопии в качестве уникального неразрушающего метода контроля физико-химического состояния атомов актиноидов, лантаноидов и переходных металлов в объеме образца ограничены, прежде всего, трудностью интерпретации экспериментальных данных.

Нами предложен эффективный метод определения химических сдвигов [1] в рамках концепции атома в соединении [2] путем расчета электронной структуры химических соединений с использованием релятивистского псевдопотенциала [3] и последующим восстановлением волновых функций вблизи атомных ядер [4]. В работе [2] с использованием свойства пропорциональности [4] показано, что эти величины с высокой степенью точности зависят только от «зарядов парциальных волн» $Q_{lj}^$\lesssim$ - вкладов валентных одноэлектронных состояний с определенными значениями полного j и орбитального l угловых моментов в заряд электронной подсистемы в пределах остовой области рассматриваемого атома, ограниченной сферой радиуса R_c .$

В настоящей работе разработанный метод применен к определению химических сдвигов K_α линий атома Nb в молекулярных кластерах различного размера, описываемых общей стехиометрической формулой Nb_2O_5 , относительно таковых в металлическом ниобии. Исследована зависимость величины химического сдвига от размера кластера. Для расчета химических сдвигов переходов K_β ниобия проведено обобщение разработанного метода, учитывающее отклонения от свойства пропорциональности при увеличении радиуса остова R_c .

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 14-31-00022.

1. Lomachuk Yu. V., Titov A. V. // Phys. Rev. A 2013. V. 88 062511.
2. Titov A. V., Lomachuk Yu. V., Skripnikov L. V. // Phys. Rev. A 2014. 90, 052522.
3. Mosyagin N. S., Zaitsevskii A. V., Titov A. V. // Int. Rev. At. Mol. Phys. 2010, V. 63, N. 1.
4. Titov A. V., Mosyagin N. S., Petrov A. N., DeMille D. // Progr. Theor. Chem. Phys. B 2006, V. 15, 253 .

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ ФЕРМИ- И БОЗЕ-ЧАСТИЦ НА ДВУМЕРНОЙ РЕШЁТКЕ В РАМКАХ КЛАСТЕРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Николаев С.В.^{*1}, Кузьмин В.И.², Овчинников С.Г.²

¹СФУ, Красноярск, RU, ²ИФ СО РАН, Красноярск, RU

*svinikolaev@sfu-kras.ru

В настоящее время учёт пространственных корреляций является актуальной задачей в физике конденсированного состояния вещества. В данной работе мы представляем результаты исследования двумерных ферми- и бозе-систем с сильными корреляциями в рамках развиваемого нами кластерного подхода – кластерной теории возмущений в представлении X -операторов Хаббарда [1-3]. В частности, мы проводим исследования спектральных свойств квазидвумерных высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) и ультрахолодных атомов в двумерных оптических ловушках при различных внешних возмущениях.

Результаты исследования можно разделить на две части: исследование аномальных свойств электронной структуры двумерной модели Хаббарда и исследование спектральных свойств сильно коррелированных бозонов в двумерной модели Бозе-Хаббарда. Основным преимуществом использования кластерного подхода является точный учёт ближних пространственных корреляций, которые играют существенную роль при формировании физических свойств исследуемых систем. Основная идея кластерного подхода заключается в покрытии исходной решётки кластерами определенной формы и точного решения задачи для отдельного кластера. Межкластерное взаимодействие учитывается по теории возмущений.

Для описания ВТСП соединений мы используем двухмерную модель Хаббарда. Вычисление спектральной функции позволило получить плотность состояний, дисперсию вдоль симметричных направлений в первой четверти первой зоны Бриллюэна, поверхность Ферми (ПФ) с учётом спектрального веса квазичастиц при различных значениях дырочного допирования и величине внешнего магнитного поля. Также нами были получены нули функции Грина и проанализировано их влияние на распределение спектрального веса вдоль ПФ. В частности, было показано, что увеличение концентрации дырок приводит к двум квантовым фазовым переходам, которые сопровождаются изменением топологии ПФ.

Исследование спектральных свойств ультрахолодного газа бозе-атомов в двумерной оптической решётке мы проводили в рамках модели Бозе-Хаббарда [4]. Были рассчитаны плотности состояний и дисперсии вдоль симметричных направлений. Исследован квантовый фазовый переход от фазы Мотта к сверхтекучей фазе. В частности, построена фазовая диаграмма в переменных химпотенциал - параметр перескока, на которой определена граница между состоянием Мотта и сверхтекучей фазой.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 16-02-00098), Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках научных проектов №№ 16-42-243048, 16-42-240413, а также гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ НШ-7559.2016.2 под руководством Овчинникова С.Г. (2016-2017).

1. Николаев С.В., Овчинников С.Г. // ЖЭТФ. 2010. V.138. P.717; 2012. V.141. P.135.
2. Kuz'min V.I., Nikolaev S.V., Ovchinnikov S.G. // Phys. Rev. B. 2014. V.90. P.245104.
3. Кузьмин В.И., Николаев С.В., Овчинников С.Г. // ЖЭТФ. 2016. V.150. P.592.
4. Kudashkin K., Nikolaev S., Ovchinnikov S. // J. Supercond. Nov. Magn. 2017. V.30. P.103.

ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННО ОБУЧАЕМЫХ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ОКСИДНЫХ И КАТОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Новиков И.С.^{*}, Шапеев А.В.

Сколтех, Москва, RU

*i.novikov@skoltech.ru

Атомистическое моделирование как оксидных, так и катодных материалов представляет большой практический интерес в настоящее время. Использование квантово-механических моделей для изучения таких материалов требует большого числа вычислительных ресурсов. В то же время, существующие полуэмпирические межатомные потенциалы не всегда способны моделировать свойства материалов, представляющих интерес, с необходимой точностью. Наконец, для проектирования катодных материалов нового поколения важно знать распределение частичных зарядов. В силу сказанного выше, особое значение приобретают модели, способные точно и быстро моделировать свойства оксидных и катодных материалов.

В работе рассматривается комбинированная модель, которая включает в себя межатомный потенциал, являющийся обобщением потенциала, предложенного в [1], а также модель эквilibрирования зарядов (QEq model) [2], которая позволяет предсказывать распределение частичных зарядов. Параметры предложенного комбинированного межатомного потенциала определяются путем его машинного обучения на квантово-механических данных. Продемонстрирована применимость полученной модели на достаточно широком диапазоне температур (на примере Al_2O_3 , SiO_2). Кроме того, на примере системы Li_xTiO_2 ($0 < x < 1$), показана эффективность модели для расчета энергетического барьера методом упругой ленты (NEB) при диффузии атома Li.

1. Shapeev A. V. Moment Tensor Potentials: a class of systematically improvable interatomic potentials // Multiscale Modeling and Simulation. – 2016. – Т. 14. – №. 3. – С. 1153-1173..
2. Anthony K. Rappe, William A. Goddard. Charge Equilibration for Molecular Dynamics // J.Phys.Chem, 1991, 95, 3358-3363.

ФАЗОВАЯ ДИАГРАММА ВОДОРОДА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Норман Г.Э. , Саитов И.М.*

НИУ ВШЭ, Москва, RU

**genri.norman@gmail.com*

Сделан обзор теоретических и экспериментальных данных по фазовым переходам в водороде при высоких давлениях порядка 0.1-10 Мбар. Рассмотрены кривые фазовых равновесий при плавлении и при полиморфных переходах в твёрдом водороде. Особое внимание уделяется фазовому переходу флюид-флюид и переходу твёрдого водорода в проводящее состояние с повышением давления. Рассмотрена природа фазового перехода первого рода флюид-флюид; ионизация молекул водорода. Указано на его связь с предсказанием плазменного фазового перехода Нормана и Старостина 1968 года. Аналогичный эффект ионизации молекул обнаружен при переходе твёрдого водорода в проводящее состояние. Рассмотрено возможное влияние метастабильных состояний на результаты экспериментальных наблюдений перехода флюид-флюид. Обсуждается возможность существования аналогичных переходов флюид-флюид в других веществах.

Исследование финансировалось в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД ФЛЮИД-ФЛЮИД В РАЗОГРЕТОМ ПЛОТНОМ ВОДОРОДЕ

Норман Г.Э.¹, Саитов И.М.¹, Сартан Р.А.^{2}*

¹НИУ ВШЭ, Москва, RU, ²ОИВТ РАН, Москва, RU

**r.sartan@gmail.com*

Вводится идея, что при фазовом переходе флюид-флюид в разогретом плотном водороде/дейтерии происходит ионизация молекул H_2 с образованием молекулярных ионов H_2^+ и H_3^+ . Методом исследования является квантовое молекулярное моделирование. Рассчитаны парные корреляционные функции (ПКФ) $g(r)$, построена изотерма на фазовой диаграмме давление-плотность, обнаружены точки, соответствующие метастабильному состоянию. Предложен способ обработки ПКФ для диагностики фазового перехода.

Значения ПКФ $g(r_{max1})$ и $g(r_{min1})$ в области первого максимума и минимума быстро меняются при фазовом переходе. Отношение этих значений $g(r_{max1})/g(r_{min1})$ подчеркивает характер изменений. Резкое изменение этого отношения в зависимости от плотности водорода являются хорошей диагностикой фазового перехода, поскольку совпадает со положением плато изотермы в координатах давление-плотность.

Значение r_{max1} совпадает с межъядерным расстоянием $d_{H_2} = 0.74 \text{ \AA}$ в H_2 . Значение r_{min1} близко к межъядерным расстояниям $d_{H_2^+} = 1.06 \text{ \AA}$ и $d_{H_3^+} = 0.92 \text{ \AA}$ в ионах $d_{H_2^+}$ и $d_{H_3^+}$. При чем расстояния d_{H_2} , $d_{H_2^+}$, $d_{H_3^+}$ меньше среднего расстояния между атомами водорода исследуемой плотности $\bar{r} \approx 1.6 \text{ \AA}$. Пусть $g_1(r)$ и $g_2(r)$ являются значениями ПКФ, ближайшими к фазовому переходу до и после него. Показано, что функция $\Delta g(r) = g_2(r) - g_1(r)$ близка к нулю для $r > 2 \text{ \AA}$, имеет глубокий минимум при $r = d_{H_2}$, ярко выраженный максимум при $r = d_{H_3^+}$ и накрывает $d_{H_2^+}$. Это означает, что при фазовом переходе уменьшается количество молекул H_2 и возникают H_2^+ и H_3^+ .

Предложен двухступенчатый механизм перехода. Происходит плазменный фазовый переход с частичной ионизацией молекул H_2 и образованием ионов H_2^+ . Затем образуются ионы H_3^+ в результате реакции молекул H_2 с ионами H_2^+ . Природа перехода сочетает ионизацию со структурными изменениями. Сильная ионизация при фазовом переходе флюид-флюид в разогретом плотном водороде/дейтерии сближает этот переход с предсказанием плазменного фазового перехода Нормана-Старостина и отличает его от переходов жидкость-жидкость типа Бражкина.

Получены точки, соответствующее метастабильному состоянию. Возможность существования различных фаз при одной температуре и плотности может объяснить расхождение в экспериментальных работах по определению положения фазового перехода.

Исследование финансировалось в рамках гранта МК-3231.2017.8.

РАСЧЕТ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ДИЭЛЕКТРИКАХ МОТТА-ХАББАРДА С УЧЕТОМ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ПРИ ОПТИЧЕСКОЙ НАКАЧКЕ.

Овчинников С.Г. , Гавричков В.А., Полужеев С.И.*

ИФ СО РАН, Красноярск, RU

**sgo@iph.krasn.ru*

В последние 10 лет после создания фемтосекундных лазеров появилось много экспериментальных работ по сверхбыстрому оптическому управлению магнитным порядком. Их целью является сверхбыстрое перемагничивание магнитных материалов, что позволит резко уменьшить время считывания и перезаписи информации на магнитных носителях памяти, и тем самым резко увеличить быстродействие. В связи с этим возникла теоретическая проблема выяснения механизмов сверхбыстрого перемагничивания, проблема очень сложная и далеко не решенная в настоящее время. В данном докладе обсуждаются современные методы расчета обменного взаимодействия в магнитных диэлектриках-оксидах переходных металлов, на которых выполнено много экспериментов по сверхбыстрому перемагничиванию. Типичным примером таких материалов служат MnO , La_2CuO_4 , $FeVO_3$. Все они относятся к классу диэлектриков Мотта-Хаббарда, в которых диэлектрические свойства определяются сильным кулоновским взаимодействием, большим по сравнению с кинетической энергией электронов. Простейшей моделью, качественно описывающей их свойства, является модель Хаббарда. В рамках этой модели можно получить обменный интеграл с учетом основных состояний катионов и анионов. Реалистичное описание электронной структуры и свойств диэлектриков Мотта-Хаббарда возможно в развитом нами гибридном методе LDA+GTB [1]. Метод

расчета обменного интеграла с учетом возбужденных состояний катионов и анионов был развит нами в рамках LDA+GTV подхода и продемонстрирован для La_2CuO_4 [2]. Недавно мы сумели обобщить этот метод для расчета обменного взаимодействия в условиях лазерной накачки, когда катион сам находится в возбужденном состоянии [3]. Мы получили рост антиферромагнитного обменного взаимодействия в условиях стационарной накачки. Кроме того, эффективный гамильтониан содержит различные спин-экситонные взаимодействия. Для FeVO_3 со спином иона железа $5/2$ и более сложной структурой возбужденных состояний мы получили также изменение обменного интеграла при оптической накачке, а также появление дополнительного антисимметричного обменного взаимодействия Дзялошинского-Мория. Работа выполнена при финансовой поддержке грантов НШ-7559.2016.2. и РФФИ 16-02-00273.

1. Korshunov M.M. et al. // Phys.Rev. B. -2005. V.-72, N. 16. P.165104.
2. Гавричков В.А. Овчинников С.Г. // ФТТ - 2008. Т. 50, №6, С. 1037.
3. Gavrichkov V.A., Polukeev S.I. and Ovchinnikov S.G. // Phys.Rev.B 2017, V.95, N.14. P.144424

МАГНИТНЫЕ И СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В СИСТЕМАХ СО СПИНОВЫМ КРОССОВЕРОМ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Орлов Ю.С.^{*1}, Николаев С.В.², Нестеров А.И.³, Овчинников С.Г.¹

¹ИФ СО РАН, Красноярск, RU, ²ИИФиРЭ СФУ, Красноярск, RU, ³Universidad de Guadalajara, Гвадалахара, МХ

*jso.krasn@mail.ru

Спиновые кроссоверы (СК) при высоких давлениях в оксидах переходных металлов активно исследуются в последнее время [1]. СК по своей природе есть многоэлектронный эффект, заключающийся в пересечении магнитоэлектронных термов d^n - конфигураций магнитных ионов с различными значениями спина. Согласно [2], СК обусловлен конкуренцией внутриатомного хундовского обменного взаимодействия J_H и энергии кристаллического поля $10Dq$. Ярким проявлением СК является изменение мессбауэровского спектра [3] и края оптического поглощения [4] в FeVO_3 . Многоэлектронная модель электронной структуры FeVO_3 , описывающая спиновый кроссовер, а также изменение оптических спектров, была предложена в работах [5, 6]. В рамках зонной теории с учетом локальных кулоновских корреляций был рассмотрен СК в магнезиовюстите $\text{Mg}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}$ методом LDA+U [7] и в FeO методом LDA+DMFT [8]. Вопрос о влиянии межатомного обменного взаимодействия на СК практически не рассмотрен в литературе. Поскольку оно формирует магнитное основное состояние в магнитных диэлектриках и обеспечивает кооперативные свойства магнитных ионов, то представляет интерес выяснить влияние межатомного обмена на СК.

В рамках эффективного гамильтониана исследуется влияние обменного взаимодействия между возбужденными высокоспиновыми термами ионов переходных металлов в магнитных диэлектриках Мотта - Хаббарда на термодинамику системы с синглетными термами ионов в основном состоянии вблизи кроссовера синглетного и высокоспинового термов с ростом давления. Показано, что кроссовер при температурах ниже критической температуры $T^* < T_N$ является изоструктурным фазовым переходом 1-го рода и сопровождается скачком объема. Кроссовер при температурах выше T^* сопровождается плавным изменением объема кристалла. Магнитное упорядочение может быть подавлено внешним давлением, а вблизи квантовой критической точки возникает область метастабильных состояний. Квантовый фазовый переход с ростом температуры перестраивается сначала в переход 1-го, а потом 2-го рода. Особенности в поведении объема с ростом давления приводят к аномалиям модуля упругости и скорости распространения звука в системах с СК.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российской фонда фундаментальных исследований, Правительства Красноярского края, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности в рамках научных проектов №№ 16-42-243048, 16-42-240413, 16-02-00507, Совета по грантам Президента РФ (СП-1844.2016.1, НШ-7559.2016.2), Фонда развития теоретической физики «Базис», краевого государственного автономного учреждения «Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности» в рамках участия в мероприятии: «14-я Российская Школа-Симпозиум ФОАММ-2017 Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования».

1. И.С. Любутин, А.Г. Гаврилюк, УФН **179**, 1048 (2009).
2. Y. Tanabe and S. Sugano, J. Phys. Soc. Jpn. **9**, 766 (1954).
3. В.А. Саркисян, И.А. Троян, И.С. Любутин, А.Г. Гаврилюк, А.Ф. Кашуба, Письма в ЖЭТФ **76**, 788 (2002).
4. А.Г. Гаврилюк, И.А. Троян, С.Г. Овчинников, И.С. Любутин, В.А. Саркисян, ЖЭТФ **126**, 650 (2004).
5. С.Г. Овчинников, Письма в ЖЭТФ **77**, 88 (2003).
6. С.Г. Овчинников, В.Н. Заблуда, ЖЭТФ **125**, 150 (2004).
7. Z. Wu, J.F. Justo, C.R.S. da Silva, S. de Gironcoli, and R.M. Wentzcovitch, Phys. Rev. B **80**, 014409 (2009).
8. A.O. Shorikov, Z.V. Pchelkina, V.I. Anisimov, S.L. Skornyakov, and M.A. Korotin, Phys. Rev. B **82**, 195101 (2010).

АКТИВНОЕ ОБУЧЕНИЕ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Подрябинкин Е.В.^{*}, Шанеев А.В.

Сколтех, Москва, RU

*E.Podryabinkin@skoltech.ru

В последнее время для атомистического (молекулярного) моделирования всё чаще используются потенциалы межатомного взаимодействия на основе машинного обучения (или машиннообучаемые потенциалы – МОП). Их популярность растёт благодаря сочетанию высокой вычислительной производительности (сравнимой с эмпирическими потенциалами) с точностью первопринципных квантовомеханических моделей (чрезвычайно затратными в вычислительном плане). Функциональная форма таких моделей зависит от набора параметров, которые находятся, из требования близости предсказываемой энергии, сил, действующих на атомы, и/или напряжений, к соответствующим величинам рассчитанным на основе квантовомеханических моделей для некоторого набора атомных конфигураций. Основное требование к МОП – способность с произвольной точностью воспроизводить поведение любой модели межатомного взаимодействия (т.е. аппроксимировать произвольную гладкую функцию координат

атомов, каковой является энергия системы, получаемая из квантовомеханических расчётов) при увеличении числа параметров.

Одной из главных проблем, с которой сталкиваются при практическом применении МОП, является проблема переносимости, связанная с возможностью межатомных потенциалов экстраполировать, т.е. давать достаточно точные предсказания за пределами обучающей выборки (например, предсказывать энергию образования двойных вакансий, когда в обучающей выборке представлены лишь конфигурации с одиночными вакансиями). В частности, результатом использования МОП с плохой переносимостью в методе молекулярной динамики может стать переход траектории в нефизической области (например, в область слишком малых межатомных расстояний) или прекращению расчёта из-за неправдоподобно больших сил. Эта проблема можно интерпретировать как задачу построения подходящей обучающей выборки. Построение обучающей выборки для обучения надёжного МОП даже в рамках одной конкретной задачи (например, тепловые колебания атомов в кристаллической решётке), который не будет экстраполировать (на протяжении всей МД-траектории), представляет собой нетривиальную задачу, что отмечается авторами межатомных потенциалов. Причём, чем больше параметров у МОП, тем сложнее построить обучающую выборку более или менее равномерно заполняющую всё конфигурационное пространство без “дыр”.

Задача переносимости может быть решена путём применения подходов активного обучения для тренировки межатомного потенциала. В отличие от пассивного обучения, когда потенциал обучается на каждой конфигурации из обучающей выборки, в ходе активного обучения задействован специальный алгоритм отбора конфигурации для обучения. Важно подчеркнуть, что критерий отбора не должен использовать данные квантовомеханического моделирования, иначе такой подход практически бесполезен. В предлагаемом в этой работе подходе для рассматриваемой конфигурации вычисляется степень экстраполяции при расчёте энергии, сил и/или напряжений. Критерием включения конфигурации в обучающую выборку является превышение степени экстраполяции некоторого предельнодопустимого значения. Для потенциалов линейно зависящих от параметров это эквивалентно отбору конфигураций, дающих наиболее линейно-независимые уравнения в СЛАУ обучения (критерий D-оптимальности). Таким образом, если степень экстраполяции для некоторой конфигурации превышена, можно включить её в тренировочное множество и переобучить модель, предварительно получив квантовомеханические данные для этой конфигурации. Такое применение активного обучения, например, во время молекулярной динамики, позволит обучая потенциал на лету полностью решить проблему переносимости. С другой стороны, в тех практических задачах, когда обучение на лету недопустимо (т.е. должен быть использован предобученный МОП), применение описанного подхода активного обучения позволяет снизить максимальные ошибки аппроксимации квантовомеханической модели. В частности, это делает молекулярнодинамический расчёт более устойчивым.

АМОРИЗАЦИЯ В БОРЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Покаташкин П.А. , Коротаев П.Ю., Яншикин А.В.*

ФГУП ВНИИА, Москва, RU

**p.a.pokatashkin@gmail.com*

Тонкие аморфные полосы часто считаются причиной резкого изменения механических свойств в боронасыщенных керамиках. Цель работы исследовать возможные механизмы аморфизации методами крупномасштабного молекулярно-динамического моделирования.

Изучается процесс высокоинтенсивного нагружения на примере α -бора. При моделировании распространения ударных волн, а также одноосном сжатии (характерные скорости деформирования 10^8 - 10^9 с⁻¹), активируется система скольжения [101]/(010). Сдвиговая деформация приводит к нанодвойникованию. В работе производится исследование этого дефекта. В ходе статических и динамических расчетов показано, что нанодвойник не может аморфизоваться сам по себе. Он остается стабильным при высоких давлениях и температурах. Тем не менее, сопутствующая пластическая деформация приводит к локальному увеличению плотности, что и является предшественником аморфизации. Показано, что сдвиг в плоскости (010) и аморфная зона начинаются в одном месте, что согласуется с экспериментальными наблюдениями. Аморфная зона крайне чувствительна к локальным упругим полям, поэтому предпочтительных направлений распространения не обнаружено. Этим объясняется разнообразие кристаллографических плоскостей, в которых наблюдаются аморфные зоны.

МЕХАНИЗМЫ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В НАНОЖИДКОСТЯХ В СВЯЗИ С ПРОБЛЕМАМИ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Рудяк В.Я.

НГАСУ, Новосибирск, RU

valery.rudyak@mail.ru

Наножидкость является необычным двухфазным флюидом. Это связано с двумя обстоятельствами. Во-первых, несущий флюид может быть и жидкостью, и газом. Ясно, что механизмы процессов переноса в соответствующих наногазовзвесах и наносuspensionях будут радикально отличаться. Более того, в наногазовзвесах они будут существенно различаться и в зависимости от плотности несущего газа, от соотношения размера наночастиц и длины свободного пробега молекул, от плотности псевдогаза наночастиц. С другой стороны, наночастицы — это мезообъект, занимающий по размерам промежуточное положение между молекулами (атомами) и макроскопическими частицами. Они обладают весьма необычными свойствами, необычными оказываются и свойства наносuspensionей. В частности, процессы переноса в них не описываются известными классическими теориями (Эйнштейна, Максвелла и т.п.). Более того, в силу указанной мезоскопичности процессы переноса в наножидкостях не удастся интерпретировать посредством обычных макроскопических теорий. Фактически единственным приемлемым методом их моделирования является метод молекулярной динамики.

Сегодня экспериментально и методом молекулярной динамики уже надежно установлено, что коэффициенты вязкости и теплопроводности наножидкостей обычно превосходят соответствующие значения для крупнодисперсных жидкостей. Кроме того, вязкость и теплопроводность наножидкостей зависит не только от концентрации наночастиц, как в крупнодисперсных жидкостях, но также от их размеров и материала. Однако вязкость наножидкостей растет с уменьшением размера наночастиц, а теплопроводность напротив падает. Внятно

ответить на вопрос почему, можно лишь понимая механизмы процессов переноса в наножидкостях. Сложность их интерпретации связана с наличием в системе существенно разных масштабов: микро и нано. Данный доклад посвящен анализу механизмов процессов переноса в наножидкостях. Объяснение этих механизмов по необходимости дается синтетическое, сочетающее и континуальный, и микроскопический подходы.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 17-01-00040).

ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ ОБЪЕМНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ЛИСТОВ ГРАФЕНА, НАНОТРУБОК И ФУЛЛЕРЕНОПОДОБНЫХ МОЛЕКУЛ

*Рысаева Л.Х.*¹, Баимова Ю.А.¹, Лисовенко Д.С.²*

¹ИПСМ РАН, Уфа, RU, ²ИПМех РАН, Москва, RU

*lesya813rys@gmail.com

В последнее время большое внимание направлено на изучение материалов на основе различных полиморфов углерода, демонстрирующих новые интересные свойства. Одним из таких материалов являются углеродные алмазоподобные фазы (УАФ), которые представляют собой трехмерную углеродную структуру, где каждый атом углерода соединен с четырьмя другими атомами углерода, аналогично структуре алмаза. К ним относятся, например, графан состоящий из листов графена, тубулан – из углеродных нанотрубок, фуллеран – из фуллереноподобных молекул [1-4]. Подобные структуры и их свойства активно исследуются на протяжении последних лет, поскольку прогнозируется их применение для создания защитных покрытий.

Методом молекулярной динамики были найдены устойчивые равновесные структуры и рассмотрено влияние сдвигового напряжения на изменение механических и физических свойств УАФ на основе фуллереноподобных молекул, нанотрубок и листов графена. Моделирование проводилось с использованием свободно распространяемого пакета моделирования LAMMPS, где взаимодействие между атомами углерода описывается эмпирическим потенциалом межатомного взаимодействия AIREBO. Данный потенциал был успешно использован ранее для исследования физических и механических свойств различных углеродных систем.

В результате исследования было рассмотрено поведение УАФ при приложении упругой деформации растяжения и сдвига, рассчитаны технические коэффициенты упругости (модуль Юнга, коэффициент Пуассона, модуль сдвига). Исследованы трехмерные гибридные sp²-sp³ наноструктуры на основе шпильчатых валентными связями структурных элементов, демонстрирующие аномальные упругие свойства, например отрицательный коэффициент Пуассона, что характерно для ауксетиков. Структуры-ауксетики были найдены среди фуллеранов, что открыло перспективы поиска ауксетиков также среди графанов и тубуланов.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда 14-13-00982.

1. Грешняков В.А., Беленков Е.А., Березин В.М. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз. Челябинск: ЮУрГУ. 2012.
2. Лисовенко Д.С., Баимова Ю.А., Рысаева Л.Х., Городцов В.А., Дмитриев С.В. // ФТТ. 2017. Т.59. В.4. С.801.
3. Baïmova J. A., Rysaeva L. Kh., Liu B., Dmitriev S. V., Zhou K. // Phys. Stat. solidi (b). 2015. I.252. №7. P.1502.
4. Рысаева Л.Х., Баимова Ю.А., Лисовенко Д.С., Крылова К.А., Дмитриев С.В., Городцов В.А. // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 1. С. 105.

АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И РАЗВИТИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ

Стегайлов В.В.

НИУ ВШЭ, Москва, RU

stegailov@gmail.com

В докладе будет представлен анализ текущего состояния российской суперкомпьютерной отрасли и описана ее роль для решения задачи атомистического моделирования [1,2]. Будет проведено сравнение различных архитектур суперкомпьютеров для квантовых и классических МД расчетов [3,4] и рассмотрены новые типы аппаратного обеспечения [5,6]. В докладе будет представлен анализ современного состояния проблемы энергопотребления суперкомпьютеров [7,8]. Кроме того, будет представлен новый суперкомпьютер ОИВТ РАН, состоящий из 32 узлов с графическими ускорителями, соединенных между собой низколатентным интерконнектом с высокой пропускной способностью – сетью Ангара, разработанной в АО “НИЦЭВТ” [9].

Исследование финансировалось в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

1. В. В. Стегайлов, Г. Э. Норман. Проблемы развития суперкомпьютерной отрасли в России: взгляд пользователя высокопроизводительных систем // Программные системы: теория и приложения: электрон. научн. журн. 2014. Т. 5, № 1(19), с. 111–152.
2. Г. Э. Норман, Н. Д.Орехов, В. В. Писарев, Г. С. Смирнов и др. Зачем и какие суперкомпьютеры экзафлопсного класса нужны в естественных науках // Программные системы: теория и приложения, 2015, 6:4(27), с. 243–311.
3. Г. С. Смирнов, В. В. Стегайлов, Эффективность алгоритмов классической молекулярной динамики на суперкомпьютерном аппаратном обеспечении // Матем. моделирование, 28:5 (2016), 95–108.
4. Stegailov, V. V., Orekhov, N. D., Smirnov, G. S. (2015, August). HPC hardware efficiency for quantum and classical molecular dynamics. In International Conference on Parallel Computing Technologies (pp. 469-473). Springer.
5. В.П.Никольский, В.В.Стегайлов, Эффективность процессоров архитектуры ARM для расчетов классической молекулярной динамики // Вычислительные методы и программирование. 2015. Т. 16. С. 578.
6. Nikol'skiy, Vsevolod P., Vladimir V. Stegailov, Vyacheslav S. Vecher. Efficiency of the Tegra K1 and X1 systems-on-chip for classical molecular dynamics. In High Performance Computing & Simulation (HPCS), 2016 International Conference on, pp. 682-689. IEEE, 2016.
7. Vecher, Vyacheslav, Vsevolod Nikol'skii, Vladimir Stegailov. GPU-Accelerated Molecular Dynamics: Energy Consumption and Performance. In Russian Supercomputing Days, pp. 78-90. Springer, 2016.

8. Vladimir Stegailov, Vyacheslav Vecher, Efficiency analysis of Intel and AMD x86_64 architectures for ab initio calculations: a case study of VASP // Proceedings of the International Conference Russian Supercomputing Days (RusSCDays-2017), Moscow, Russia, September 25-26, 2017.
9. Vladimir Stegailov, Alexander Agarkov, Sergey Biryukov, Timur Ismagilov, Mikhail Khalilov, Nikolay Kondratyuk, Evgeny Kushtanov, Dmitry Makagon, Anatoly Mukosey, Alexander Semenov, Alexey Simonov, Alexei Timofeev, Vyacheslav Vecher, Early performance evaluation of the hybrid cluster with torus interconnect aimed at molecular-dynamics simulations // Proceedings of the 12th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM-2017), Lublin, Poland, September 10-13, 2017.

ЭФФЕКТИВНЫЕ СОСТОЯНИЯ АТОМОВ В МАТЕРИАЛАХ: ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И РАСЧЕТЫ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ РЕНТГЕНОЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ Nb В НИОБАТАХ И Yb ВО ФТОРИДАХ

Титов А.В., Шахова В.М., Ломачук Ю.В., Мальцев Д.А., Скрипников Л.В., Мосягин Н.С., Петров А.Н., Демидов Ю.А., Семенов С.Г., Зайцевский А.В.*

НИЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, RU

**titov_av@pnpi.nrcki.ru*

В докладе речь пойдет о релятивистских методах расчета электронной структуры и свойств химических соединений тяжелых элементов и о конкретных расчетах, выполняемых лабораторией квантовой химии ПИЯФ для решения различных задач в физике и химии. Теоретические разработки, лежащие в основе обсуждаемых вычислительных технологий лаборатории, — это метод обобщенного релятивистского псевдопотенциала (ОРПП) [1] и техника восстановления электронной структуры в остовах тяжелых элементов [2] после расчета соединения с ОРПП; теория химических сдвигов рентгеноэмиссионных спектров (РЭС) [3] и концепция “атомов в соединениях” [4]. С помощью этих подходов уже осуществляется теоретическая поддержка экспериментов по поиску новой физики за пределами Стандартной модели и по “химической идентификации” новых долгоживущих сверхтяжелых элементов, синтезированных в ОИЯИ (Дубна). В последние годы эти подходы используются нами в рамках многоуровневой технологии расчета сложных многоатомных систем (материалов и т.д.), которые могут включать *d*- и *f*-элементы (переходные металлы, лантаниды и актиниды).

Представлены первые результаты двухшагового расчета химических сдвигов РЭС на примере атома Nb в феррмите (с основной формулой CaNb_2O_6) по отношению к металлическому ниобию. Также обсуждаются результаты расчетов химических сдвигов линий K_α для трифторида иттербия в сравнении с дифторидом иттербия. Расчет электронной структуры этих кристаллов в кластерном приближении осуществляется с использованием DFT, методов ОРПП [1], восстановления волновых функций в окрестностях атомных ядер [2], а также потенциалов встраивания кластера в кристалл. Значения химических сдвигов получены с использованием недавно разработанных в лаборатории методов [3-4]. Обсуждается перспективность использования химических сдвигов РЭС для неразрушающего контроля химического состояния *d*- и *f*-элементов в материалах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 14-31-00022.

1. N. S. Mosyagin, A. V. Zaitsevskii, A. V. Titov, *Int. Rev. At. Mol. Phys.* **1**, 63 (2010).
2. A. V. Titov, N. S. Mosyagin, A. N. Petrov, D. DeMille, *Progr. Theor. Chem. Phys.*, **B15**, 253 (2006).
3. Yu. V. Lomachuk and A. V. Titov, *Phys. Rev. A* **88**, 062511 (2013).
4. A. V. Titov, Yu. V. Lomachuk, L. V. Skripnikov *Phys. Rev. A* **90**, 052522 (2014); L. V. Skripnikov, A. V. Titov, *Phys. Rev. A* **91**, 042504 (2015); A.V. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, *Mendeleev Comm.*, **26**, 307 (2016).

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОДХОДЫ ПРИ ИЗУЧЕНИИ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СИСТЕМ

Томиллин Ф.Н., Овчинников С.Г.*

ИФ СО РАН, Красноярск, RU

**felixnt@gmail.com*

Определение пространственных структур конформационных состояний биологических объектов обеспечило значительный прогресс в понимании механизмов в биологии и роли отдельных веществ, но пространственная структура обеспечивает информацию только о статическом состоянии биомолекул. Какие изменения происходят непосредственно в ходе различных физико-химических процессов, остаётся неизвестным. Более того основная проблема большинства экспериментальных методов заключается в том, что проводимые исследования атомной и электронной структур не дают прямой информации об объекте, поскольку условия измерения параметров очень часто отличаются от физиологических условий. Восполнить этот пробел позволяют современные квантово-химические методы расчётов, которые в настоящее время широко применяются для исследования атомной структуры, кинетики реакций, фотофизических процессов.

Прогресс теоретических методов и вычислительной техники позволяет дать ответы на многие вопросы. Например, в работе, на основании расчётов оценивается поведение молекул феромонов при воздействии на них солнечной радиации и влияние таких внешних факторов как влажность воздуха. С помощью квантово-химических методов можно изучать биохимические и фотофизические механизмы в таких сложных системах как фотопротеины. Теоретические подходы позволяют на хорошем теоретическом уровне проанализировать атомную и электронную структуры системы, а также моделировать возможные химические превращения субстратов, которые могут происходить в результате биологических процессов. Теоретическое моделирование позволяет восстанавливать структуру из малоуглового рассеяния электронов. Это особенно важно для аптамеров – структура которых сильно зависит от условий эксперимента и невозможностью кристаллизовать их отдельно от белков мишеней.

Работа поддержана РФФИ (грант № 16-04-00132а). Авторы благодарят за помощь сотрудников межведомственного суперкомпьютерного центра РАН МВС-100К.

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА КИНЕТИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ МОЛЕКУЛ И НАНОСТРУКТУР ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Федоров А.С.*¹, Высотин М.А.², Томилин Ф.Н.¹

¹ИФ СО РАН, Красноярск, RU, ²СФУ, Красноярск, RU

*alex99@iph.krasn.ru

В настоящее время в связи с развитием нанотехнологий, наноэлектроники, современных катализаторов и т.д. остро встал вопрос об определении устойчивости различных молекул, наноструктур, а также поверхностей твердых тел. Нахождение термодинамической стабильности, определяемой свободной энергией Гиббса E_{bind} часто не определяет экспериментальный выход различных наноструктур в процессе их синтеза ввиду важности факторов, определяющих кинетическую стабильность. Использование для расчета кинетической стабильности (КС) различных вариантов метода молекулярной динамики (MD) является чрезвычайно затратным, так как оно подразумевает проведение симуляции системы в течении времени, много большего обратных характерных частот тепловых колебаний ($\approx 10^{-13}$ сек.), что при стандартном кванте времени в ≈ 1 фемтосек. требует проведение порядка миллиона временных шагов. Для вычисления КС при переходе системы из одного устойчивого состояния в другое может использоваться вычисление частоты (или вероятности) перехода системы из одной геометрии в другую с помощью стандартной теории переходного состояния и применения уравнения Аррениуса. Это требует для вычисления барьера перехода $E_{barrier}$ определения гиперповерхности потенциальной энергии системы в многомерном пространстве параметров-координат атомов. Для многоатомных систем это становится практически непосильной задачей, даже при использовании эмпирических потенциалов при определении потенциальной энергии системы.

Таким образом, в настоящее время отсутствует эффективный метод определения кинетической стабильности наноструктур, а также поверхностей твердых тел при высоких температурах, когда химические связи могут разрушаться под действием тепловых колебаний. Нами в [1] был разработан универсальный метод определения кинетической стабильности (КС) наноструктур при высоких температурах, когда наноструктура разрушается из-за разрыва химических связей под действием тепловых колебаний атомов. Метод основан на вычислении вероятности растяжения любой химической связи в структуре до предельной величины L_{max} , выше которой связь разрывается. Для нахождения КС, в предположении большого количества колебаний и их независимости с использованием центральной предельной теоремы выводится формула, определяющая вероятность растяжения любой химической связи до величины L_{max} . В данной работе с помощью предварительных квантово-химических расчетов методом DFT с помощью пакета VASP [2] предложенный метод был протестирован на примере вычисления КС для всех различных изомеров фуллеренов, удовлетворяющих правилу изолированных пентагонов (IPR rule), в диапазоне от C_{20} до C_{100} , с общим количеством около 36000. Было показано, что КС фуллеренов от C_{20} до C_{100} хорошо коррелируют с экспериментальным выходом соответствующих фуллеренов. Также путем усреднения по всем исследованным фуллеренам для КС каждой химической связи, связывающей два смежных пятиугольника, пятиугольника и шестиугольника и два шестиугольника было показано, что связи на границе двух смежных пятиугольников на 3 порядка менее прочные по сравнению со связями, соединяющими смежные шестиугольники, что доказывает правило IPR.

Также данный метод был применен для расчета КС связей внутри молекул некоторых простых линейных и разветвленных углеводородов. Было показано, что КС в данных углеводородах согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Работа была выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ N15-02-06869А.

1. A. S. Fedorov, D. A. Fedorov, A. A. Kuzubov, P. V. Avramov, Y. Nishimura S. Irle and Henryk A. Witek, Phys.Rev. Lett., **107**, No.17, 75506-1 (2011).
2. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B47, RC558 (1993).

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ ВАКАНСИЙ: ЗА ПРЕДЕЛАМИ ТОЧНОСТИ МЕТОДА NEB

Фиданян К.С.*¹, Стегайлов В.В.²

¹ОИВТ РАН, Москва, RU²НИУ ВШЭ, Москва, RU

*fidanyan@phystech.edu

Диффузия вакансий определяет множество микроскопических процессов, протекающих в ядерных материалах. Расчет коэффициента диффузии важен для построения многомасштабной модели эволюции материалов.

Общепринятой моделью температурной зависимости коэффициента диффузии дефектов является уравнение Аррениуса $D = D_0 \exp(-E_a/k_B T)$, где E_a это барьер свободной энергии, а D_0 – эффективная частота попыток перескока [1]. Наиболее распространенным методом расчета барьера миграции в молекулярно-динамических расчетах является Метод упругой ленты (NEB) [2]. Однако вопрос о точности этого метода остается открытым. В частности, известно, что за время скачка вакансии не происходит полной релаксации соседних атомов [3]. Этот факт свидетельствует о том, что метод NEB может завышать барьер реакции. Также метод NEB неприменим в случаях, когда решетка нестабильна при нулевой температуре, например, ОЦК решетка урана [4]. В данной работе показано, что прямое молекулярно-динамическое моделирование движения вакансий дает результат отличный от предсказанного с помощью NEB. Обсуждается температурная зависимость энергии миграции и метод ее расчета.

Данная работа поддержана грантом РФФИ №14-50-00124.

[1] Vineyard G 1957 *J. Phys. Chem. Solid* **3** 121–127

[2] Henkelman G, Uberuaga B P and Jónsson H 2000 *The Journal of Chemical Physics* **113** 9901–9904

[3] Valikova I and Nazarov A 2010 *The physics of metals and metallography* **109** 220–226

[4] Fidanyan K S and Stegailov V V 2016 *Journal of Physics: Conference Series* **774** 012031

ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ МИКРОЧАСТИЦ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЕ

Филиппов А.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, RU

fav@triniti.ru

Потенциал взаимодействия макрочастиц в электролитах и пылевой плазме необходим для проведения численного моделирования методами молекулярной динамики и Монте-Карло равновесных свойств, процессов переноса и условий фазовых переходов этих систем. Сегодня для этих целей используется экранированный потенциал, полученный в рамках теории Дебая-Хюккеля, также часто называемый потенциалом Юкавы. В настоящей работе рассмотрены видоизменения потенциала взаимодействия заряженных макрочастиц в пылевой плазме при изменении давления плазмообразующего газа от низких порядка 1 Па до высоких порядка атмосферного.

Для описания изменения характера экранирования кулоновского потенциала при переходе от низких давлений к высоким используется подход, развитый в работе [1], в которой создана кинетическая теория экранирования электрического поля заряженных макрочастиц в неравновесной плазме на основе кинетических уравнений Власова, дополненных столкновительными членами в форме Бхатнагара-Гросса-Крука [2], и метода точечных стоков [3]. В методе точечных стоков поглощение электронов и ионов макрочастицей описывается путем введения эффективных точечных стоков в кинетические уравнения для электронов и ионов плазмы. С учетом столкновений электронов и ионов с нейтральными атомами буферного газа определены явные выражения для распределения потенциала вокруг макрочастицы и эффективных зарядов, определяющих поведение потенциала на больших расстояниях. Рассмотрены случаи постоянной частоты столкновений и постоянной длины свободного пробега электронов и ионов в буферном газе. Выполнены численные расчеты для пылевой изотермической и неизотермической плазмы в гелии, неоне, аргоне, криптоне и ксеноне при давлениях $10^{-1} - 10^4$ Па, характерных для экспериментов по изучению пылевой плазмы. Показано, что столкновения и стоки электронов вносят пренебрежимо малый вклад в распределение потенциала, а отклонения от дебаевского экранирования определяются ионной компонентой как в изотермической, так и в неизотермической плазме.

При высоких давлениях для определения потенциала взаимодействия используется диффузионно-дрейфовое приближение с объемными источниками рождения и гибели заряженных частиц плазмы и с их точечными стоками на макрочастицы [3]. Было установлено, что потенциал является суммой двух дебаевских экспонент, при этом первая постоянная экранирования близка к дебаевской, а вторая определяется характерным размером области амбиполярного разделения зарядов. Изучено, как движение макрочастиц влияет на их потенциал взаимодействия.

Для изучения процессов коагуляции макрочастиц нужен потенциал взаимодействия на малых межчастичных расстояниях. Поэтому выполнен учет влияния размера макрочастиц на потенциал взаимодействия как в вакууме или однородном диэлектрике [4], так и в плазме или электролите [5]. Изучены случаи как постоянных зарядов, так и постоянных потенциалов поверхности макрочастиц. Показано, что при средних и больших межчастичных расстояниях, потенциал взаимодействия хорошо описывается потенциалом Дерягина-Ландау-Ферфея-Овербея, а при малых необходим учет поляризации поверхностного заряда.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект №16-12-10424.

1. Филиппов А.В., Загородний А.Г., Паль А.Ф., Старостин А.Н., Момот А.И. // Письма в ЖЭТФ. 2007. Т. 86. С. 873.
2. Bhatnagar P.L., Gross P.E., Krook M. // Phys. Rev. 1954. V. 54 / P. 511.
3. Филиппов А.В., Загородний А.Г., Момот А.И., Паль А.Ф., Старостин А.Н. // ЖЭТФ. 2007. Т. 131. С. 164.
4. Муниров В.Р., Филиппов А.В. // ЖЭТФ. 2013/ Т. 144. С. 931.
5. Филиппов А.В., Дербенев И.Н. // ЖЭТФ. 2016. Т. 150. С. 1262.

МАШИННОЕ ОБУЧЕНИЕ ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ЭЛЕКТРОННЫХ ЗОН Si

Цымбалов Е.А*, Шапеев А.В.,

Сколтех, Москва, RU

*etsymbalov@gmail.com

Упругая деформация материалов - современный подход для управления свойствами материалов на атомном уровне - имеет множество применений в электронике, фотонике и машиностроении. Квантово-механические вычисления на основе теории функционала плотности обеспечивают приемлемую точность для решения задач такого рода, однако для решения задач оптимизации (например, уменьшения ширины запретной зоны при фиксированном максимальном растяжении) требуется выполнить большое количество таких вычислений, увеличивая вычислительную сложность задач проектирования материалов. Использование суррогатных моделей, построенных на данных квантово-механических вычислений позволяет решать такие задачи быстро; более того, модели такого рода, основанные на нейронных сетях, позволяют дообучаться на дополнительных данных, продлевая жизненный цикл модели.

В данном докладе рассмотрена задача аппроксимации электронных зон для деформированного кристалла кремния при помощи искусственных нейронных сетей. Для широкого спектра задач достигнута точность порядка 0.01 эВ. Приводится сравнение с другими методами машинного обучения и регрессии. Численные эксперименты демонстрируют способность метода к дообучению. Данный подход может быть применен для других задач материаловедения.

РАЗВИТИЕ ИДЕЙ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ БИОМОЛЕКУЛ В МЕТОДЕ БЕЛКОВОЙ ТОПОГРАФИИ

Чугунов А.О. , Ефремов Р.Г.*

НИУ ВШЭ, Москва, RU

**batch2k@yandex.ru*

Взаимосвязь структуры биомолекул с их функциями — центральный вопрос в физико-химической, структурной и компьютерной биологии. Нахождение этой закономерности дает ответы не только на фундаментальные биологические вопросы, но и лежит в основе рационального поиска и дизайна биологически активных молекул — в т.ч., лекарств. Однако, в отличие от низкомолекулярных веществ, где созданы алгоритмы поиска химического сходства (такие как модели фармакофоров), для биоактивных пептидов — например, токсинов и нейрорегуляторов — аналогичных методов не существует.

Мы предлагаем новый подход к анализу строения небольших (от 10 до 100-200 аминокислотных остатков) компактных белков, основанный на картировании распределения на их молекулярной поверхности различных физико-химических и геометрических свойств, таких как, например, электростатический потенциал, гидрофобность, рельеф и кривизна поверхности. Этот метод, названный «белковой топографией» [1], использует упрощенное рассмотрение белковых молекул, приводимое к сферическим проекциям. Основные его преимущества: 1) учет молекулярной динамики белков; 2) возможность визуально и численно сравнивать «карты» разных объектов; 3) вычисление «усредненных» карт, несущих детерминанты, обязательные для проявления молекулами определенной биологической активности; 4) построение «дифференциальных» карт, подчеркивающих различия между, например, двумя группами пептидов, обладающих различной биологической активностью. Данный алгоритм продолжает методологический подход «многомасштабного моделирования», в рамках которого представление биологических молекул идет по пути уменьшения степеней свободы и упрощения описания.

Мы применили этот подход к нескольким семействам биоактивных пептидов — альфа-нейротоксинам из яда скорпионов [2], действующим на активацию потенциал-чувствительных натриевых каналов, альфа-конотоксинам из яда моллюсков [3], действующим на никотиновые ацетилхолиновые рецепторы, и мускариновым токсинам, связывающимся с мускариновыми ацетилхолиновыми рецепторами. Алгоритм позволил выявить структурные детерминанты активных молекул, в ряде случаев сформулировать принцип селективного действия и проиллюстрировать конформационный переход из неактивной формы белков в активную.

Исследование финансировалось в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

1. Koromyslova, A. D., Chugunov, A. O., Efremov, R. G. (2014). Deciphering fine molecular details of proteins' structure and function with a Protein Surface Topography (PST) method. // *J. Chem. Inf. Model.*, 54(4), 1189-1199.
2. Chugunov, A. O., Koromyslova, A. D., Berkut, A. A., Peigneur, S., Tytgat, J., Polyansky, A. A., ..., Efremov, R. G. (2013). Modular organization of alpha-toxins from scorpion venom mirrors domain structure of their targets, sodium channels. // *J. Biol. Chem.*, 288(26), 19014-19027.
3. Kasheverov, I. E., Chugunov, A. O., Kudryavtsev, D. S., Ivanov, I. A., Zhmak, M. N., Shelukhina, I. V., ..., Tsetlin, V. I. (2016). High-Affinity alpha-Conotoxin PnIA Analogs Designed on the Basis of the Protein Surface Topography Method. *Scientific Reports*, 6.

ПРИМЕНЕНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ МЕЖАТОМНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ

Шапеев А.В. , Подрябинкин Е.В., Губаев К.В., Новиков И.С.*

Сколтех, Москва, RU

**a.shapeev@skoltech.ru*

Молекулярное (или атомистическое) моделирование - одна из самых важных областей в высокопроизводительных вычислениях. По статистике, на эту область исследований расходуется примерно 50% всего суперкомпьютерного времени. Как правило, в типичной задаче молекулярного моделирования (например, в молекулярной динамике) используется один из двух классов моделей: квантово-механические модели или полуэмпирические модели. Полуэмпирические модели (так называемые межатомные потенциалы) постулируют определенную функциональную форму энергии взаимодействия атомов (из которой можно вывести и силы) с небольшим числом параметров, которые находятся либо из экспериментальных данных, либо из квантово-механических. Такие модели очень вычислительно экономичны, но воспроизводят поведение системы, как правило, только качественно. Квантово-механические модели, напротив, на 3-6 порядков более затратны, но имеют достаточно высокую точность.

В последнее время, вместе с «революцией больших данных» появился третий подход, который сочетает высокую точность квантово-механических моделей и вычислительную эффективность полуэмпирических моделей. Этот подход основан на постулировании такой функциональной формы энергии межатомных потенциалов, чтобы аппроксимировать выбранную квантово-механическую модель с любой наперед заданной точностью за счет увеличения числа подгоночных параметров. Эти подгоночные параметры находятся из данных, сгенерированных квантово-механическими расчетами, на основе подходов машинного обучения.

В докладе будет сделан обзор существующих межатомных потенциалов, основанных на подходах машинного обучения, представлены подходы к автоматическому построению таких потенциалов на основе активного обучения, и продемонстрировано применение данного подхода к приложениям в молекулярной динамике, компьютерной разработке новых материалов, разработке сплавов и автоматическом построении фазовых диаграмм. Также будет представлен пакет программ для построения и использования межатомных потенциалов, разрабатываемый в нашей научной группе.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ ЭФФЕКТОВ И СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В МЕТАЛЛАХ, ОБЛУЧАЕМЫХ НАНОКЛАСТЕРАМИ МЕДИ

Шарипов З.А.^{*1}, Батгэрэл Б.², Купенова Т.Н.³, Пузынин И.В.¹, Пузынина Т.П.¹, Тухлиев З.К.¹, Христов И.Г.⁴, Христова Р.Д.⁴

¹ОИЯИ, Дубна, RU, ²ИФУТ АНМ, Улан-Батор, MN, ³ИИИиЯЭ БАН, София, BG, ⁴СУ, София, BG

*zarif@jinr.ru

Одним из перспективных направлений в области физики конденсированных сред является исследование взаимодействия нанокластеров с различными металлическими мишенями [1]. При взаимодействии нанокластеров с металлической мишенью в малом объеме происходит огромное выделение энергии при расчете на единицу объема и это приводит к структурным изменениям. Происхождение структурных изменений может быть следствием тепловых процессов или упругих взаимодействий (расталкивание атомов мишени). При экспериментальных исследованиях можно увидеть только результат структурных изменений в мишенях при облучении нанокластерами. Применение методов математического моделирования позволяет проследить весь процесс облучения мишеней нанокластерами.

В настоящей работе исследуются термические процессы в металлах при облучении их нанокластерами методом молекулярной динамики и в рамках модели термического пика [2, 3]. В рамках метода молекулярной динамики получены волновые эффекты переноса тепла, которые не наблюдаются при применении модели термического пика. Также получены результаты моделирования структурных изменений в облучаемых мишенях разных размеров в зависимости от энергии нанокластеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 17-01-00661-а и при частичной финансовой поддержке гранта Полномочного представителя Республики Болгария в ОИЯИ.

1. B.Batgerel, A.YU.Didyk, I.V.Puzynin et al. // Journal of Surface Investigation. 2015. V.9. pp 1026–1030.
2. M.I. Kaganov, I.M. Lifshits, L.V. Tanatarov. //JETP. 1956. V.4. №2. Pp. 173.
3. I.V. Amirkhanov, A.YU. Didyk, I.V. Puzynin et al.//PEPAN. 2006. V.37. №6. pp 837–866.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛАСТЕРОВ ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ YbF₂, YbF₃ И РАСЧЕТ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ РЕНТГЕНОВСКИХ ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ ДЛЯ ИТТЕРБИЯ

Шахова В.М.^{*1}, Ломачук Ю.В.¹, Демидов Ю.А.¹, Мосягин Н.С.¹, Скрипников Л.В.¹, Зайцевский А.В.², Титов А.В.¹

¹НИЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, RU, ²МГУ, Москва, RU

*verahcnkrf@gmail.com

Моделирование электронной структуры материалов на основе соединений *d*- и *f*-элементов и расчет их физико-химических свойств является одним из наиболее сложных разделов современной квантовой химии.

В работе была использована вычислительная технология для таких соединений, которая включает в себя расчет электронной структуры при помощи приближения релятивистского псевдопотенциала [1] и последующего восстановления волновых функций вблизи ядра [2]. Был предложен метод построения кластеров, описывающих кристаллическую структуру на примере соединений YbF₂ и YbF₃. Суть его заключается в том, чтобы наиболее корректно описать электронную структуру в области центрального атома иттербия и его первого окружения.

Выполнен анализ химических сдвигов линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС) атома иттербия в одном соединении относительно другого, так как это свойство позволяет “прозондировать” электронную структуру атома в соединении.

В расчетах был использован предложенный в работе [3] метод определения химических сдвигов (РЭС). Полученные данные сопоставлены с экспериментальным значением химического сдвига *K*_α-линии для атома иттербия в кристаллах YbF₃ относительно YbF₂ [4].

Работа выполнена при поддержке РНФ, грант № 14-31-00022.

1. Mosyagin N.S., Zaitsevskii A.V., Titov A.V. // Int. Rev. At. Mol. Phys. 2010. V.1, P.63.
2. Titov A.V., Mosyagin N.S., Petrov A.N., DeMille D. // Progr. Theor. Chem. Phys. 2006. V.B15. P.253.
3. Lomachuk Yu.V., Titov A.V. // Phys. Rev. A. 2013. V.88. P.062511.
4. Shaburov V.A., Sovestnov A.E., Savitskii E.M., Markova I.A., Chistyakov O.D., Shkatova T.M. // Solid State Phys. 1982. V.24. P.263.

ОСОБЕННОСТИ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ФУНКЦИЙ, МЯГКИЕ МОДЫ И ЛОКАЛЬНАЯ СТРУКТУРА НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Щелкачев Н.М.^{*1}, Рыльцев Р.Е.²

¹МФТИ, Долгопрудный, RU, ²ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, RU

*n.chtchelkatchev@gmail.com

Корреляционные функции (КФ) являются одним из основных источников информации о физических свойствах «мягких конденсированных систем». Как правило, с использованием результатов численного моделирования или экспериментальных данных, можно найти КФ плотности (динамический структурный фактор), динамические автокорреляционные функции скоростей, структурные динамические корреляторы, и т.д. Наиболее интересная информация, содержащаяся в КФ, скрыта в их фурье-образах, более того, в области комплексных частот (волновых векторов). Из квантовой теории сильно коррелированных систем хорошо известно, что полюса (или другие особенности) динамических КФ в комплексной плоскости, как правило, соответствуют коллективным или локализованным модам. Например, действительная часть частоты, соответствующая полюсу динамической функции Грина электронов в металле, позволяет найти энергию элементарного возбуждения, а мнимая часть – обратное время жизни. Интересный и малоизученный вопрос, каким физическим величинам соответствуют особенности

динамических КФ в комплексной плоскости частот для классических систем, таких как простые жидкости, и другие «мягкие конденсированные системы» частиц. Обычно моделирование и эксперимент позволяет найти КФ только в действительной области. Фундаментальной проблемой, поэтому, является ответ на вопрос, как перейти в комплексную плоскость частот. Решение данной задачи предполагает разработку эффективного способа численного аналитического продолжения с действительной оси частот в комплексную плоскость. Здесь имеется другая проблема, связанная с технической стороной численного аналитического продолжения: интерес представляет исследование сингулярностей комплексной функции, что предъявляет особые требования к устойчивости численного алгоритма. Возможное наличие точек ветвления и разрезов в КФ ставит вопрос, связанный с неоднозначностью аналитического продолжения. Отметим, что интересные приложения существуют и в задаче об аналитическом продолжении в комплексную область статических корреляционных функций. Так, например, фундаментальный вопрос теории жидкостей о положении линии Фишера-Уидома (линии исчезновения осцилляций структурного фактора) на фазовой диаграмме до сих пор остался малоизученным по причине необходимости исследования полюсов статического структурного фактора в области комплексных волновых векторов.

1. Ryltsev R.E., Chtchelkatchev N.M. // *Soft. Mat.* 2017 (in press)
2. Chtchelkatchev N.M., Ryltsev R.E. // *JETP. Lett.* 2015, V.102, 732–738.
3. Chtchelkatchev N.M., Klumov B.A., Ryltsev R.E., et al. // *JETP Letters*, 2016, V.103, 390–394.

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

ГНЦ РФ ТРИНИТИ — Государственный научный центр РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Троицк, Россия,
ИБХ РАН — Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук,
ИИФиРЭ СФУ — Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ, Красноярск, Россия,
ИМЕТ УрО РАН — Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург,
ИПМех РАН — Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, Россия,
ИПСПМ РАН — Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия,
ИФ СО РАН — Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН, Красноярск, Россия,
ИФХ РАН — Институт физической химии РАН, Москва,
КГУ — Казанский государственный университет, Казань, Россия,
МФТИ — Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный, Россия,
НГАСУ — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск, Россия,
НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова — Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, Россия,
НИУ ВШЭ — Национальный исследовательский университет "Высшая школа экономики", Москва, Россия,
НИЦ КИ ПИЯФ — Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ "Курчатовский институт", Гатчина, Россия,
ОИВТ РАН — Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия,
ОИЯИ — Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия,
СВФУ — Северо-Восточный федеральный университет имени М.К.Аммосова, Мирный, Россия,
Сколтех — Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия,
СПбГТИ(ТУ) — Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург, Россия,
СФУ — Сибирский федеральный университет, Красноярск, Москва,
УГНТУ — Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия,
ВГУП ВНИИА — Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова», Москва, Россия.

ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. *Бачурина Ольга Владимировна*, УГНТУ, Уфа, phone: +7(965)9201381, fax: +7(347)2431419, obachurina@yahoo.com
2. *Вервикишко Дарья*, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(916)9367000, fax: +7(916)9367000, vitkina-darya@yandex.ru
3. *Григорьев Федор Васильевич*, НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, phone: +7(495)9395424, fax: +7(495)9395424, fedor.grigoriev@gmail.com
4. *Груздков Алексей Андреевич*, СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, phone: +7(911)2883748, fax: +7(812)7127791, gruzdkov@mail.ru
5. *Губаев Константин Вадимович*, Сколтех, Москва, phone: +7(963)6129063, fax: +7(963)6129063, konstantin.gubaev@skoltech.ru
6. *Дмитриев Сергей Владимирович*, ИПСПМ РАН, Уфа, phone: +7(987)5961463, fax: +7(347)2823759, dmitriev.serгей.v@gmail.com
7. *Кауфман Елена Владимировна*, СФУ, Красноярск, phone: +7(902)9252936, fax: +7(391)2438923, aljonastar@gmail.com
8. *Кондратюк Николай Дмитриевич*, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(919)7711778, fax: +7(919)7711778, kondratyuk@phystech.edu
9. *Корзникова Елена Александровна*, ИПСПМ РАН, Уфа, phone: +7(919)6022704, fax: +7(347)2823759, elena.a.korznikova@gmail.com
10. *Коробова Наталья Владимировна*, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(929)5707060, fax: +7(495)6287931, nvkorobova_1@edu.hse.ru
11. *Кузнецов Андрей Сергеевич*, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(901)5807768, fax: +7(495)3362000, akuznecov@hse.ru
12. *Ланкин Александр Валерьевич*, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(903)5768208, fax: +7(495)4857990, Alex198508@yandex.ru
13. *Ленёв Дмитрий Юрьевич*, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(985)1753037, fax: +7(985)1753037, lenevdy@mail.ru
14. *Ломачук Юрий Вячеславович*, РНЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(921)1845015, fax: +7(81371)46106, jeral2007@gmail.com
15. *Маякова Елена Викторовна*, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(916)5118795, fax: +7(916)5118795, mayakova@mail.ru
16. *Николаев Сергей Викторович*, СФУ, Красноярск, phone: +7(906)9710014, fax: +7(391)2912967, 25sergeyn@mail.ru
17. *Новиков Иван Сергеевич*, Сколтех, Москва, phone: +7(915)0006825, fax: +7(915)0006825, i.novikov@skoltech.ru
18. *Норман Генри Эдгарович*, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(925)0420997, fax: +7(495)4857990, genri.norman@gmail.com
19. *Овчинников Сергей Геннадьевич*, ИФ СО РАН, Красноярск, phone: +7(391)2432906, fax: +7(391)2438923, sgo@iph.krasn.ru
20. *Орлов Юрий Сергеевич*, ИФ СО РАН, Красноярск, phone: +7(908)2161058, fax: +7(391)2438923, jso.krasn@mail.ru
21. *Подрябинкин Евгений Викторович*, Сколтех, Москва, phone: +7(985)5353667, fax: +7(985)5353667, evgeny.podryabinkin@gmail.com
22. *Покаташкин Павел Александрович*, ФГУП ВНИИА, Москва, phone: +7(963)9281991, fax: +7(499)9780903, p.a.pokatashkin@gmail.com
23. *Рудяк Валерий Яковлевич*, НГАСУ, Новосибирск, phone: +7(383)2668014, fax: +7(383)2664085, valery.rudyak@mail.ru
24. *Рысаева Лейсан Халиловна*, ИПСПМ РАН, Уфа, phone: +7(937)3034414, fax: +7(347)2823759, lesya813rys@gmail.com
25. *Сартан Роман Александрович*, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(495)4692378, fax: +7(495)4692378, r.sartan@gmail.com
26. *Стегайлов Владимир Владимирович*, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(495)9168876, fax: +7(495)9168876, stegailov@gmail.com
27. *Титов Анатолий Владимирович*, НИЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(964)3638324, fax: +7(81371)46106, anatoly.titov@gmail.com
28. *Томилин Феликс Николаевич*, ИФ СО РАН, Красноярск, phone: +7(950)9788890, fax: +7(391)2438923, felixnt@gmail.com
29. *Федоров Александр Семенович*, ИФ СО РАН, Красноярск, phone: +7(904)8985175, fax: +7(391)2438923, alex99@iph.krasn.ru
30. *Фиданян Карен Саркисович*, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(906)7207226, fax: +7(906)7207226, karencho616@yandex.ru
31. *Филиппов Анатолий Васильевич*, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, phone: +7(495)8415262, fax: +7(495)8415158, fav@triniti.ru
32. *Цымбалов Евгений*, Сколтех, Москва, phone: +7(905)7089326, fax: +7(905)7089326, etsymbalov@gmail.com
33. *Чугунов Антон Олегович*, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(915)1088825, fax: +7(915)1088825, batch2k@yandex.ru
34. *Шапеев Александр Васильевич*, Сколтех, Москва, phone: +7(916)3652132, fax: +7(000)0000000, a.shapeev@skoltech.ru
35. *Шарипов Зариф Алимжонович*, ОИЯИ, Дубна, phone: +7(926)7845790, fax: +7(49621)65145, zarif@jinr.ru
36. *Шахова Вера Михайловна*, НИЦ КИ ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(905)2323171, fax: +7(813)7146106, verahcnkrf@gmail.com
37. *Щелкачев Николай Михайлович*, МФТИ, Долгопрудный, phone: +7(916)9207678, fax: +7(495)7029317, n.chtchelkatchev@gmail.com