

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
18-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО
МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

«*Foundations of Atomistic Multiscale Modeling and Simulation*»

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Петров О.Ф., сопредседатель, ОИВТ РАН/МФТИ, Москва
Норман Г.Э., сопредседатель, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН/МФТИ, Москва
Стегайлов В.В., сопредседатель, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Тимофеев А.В., зам. председателя, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Харабуа Б.А., зам. председателя, зам. главы Администрации г. Новый Афон, Абхазия
Кондратюк Н.Д., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Флейта Д.Ю., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва
Гельчинский Б.Р., Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург
Губин С.А., Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва
Ефремов Р.Г., ИБХ РАН/НИУ ВШЭ, Москва
Овчинников С.Г., ИФ СО РАН/СФУ, Красноярск
Рудяк В.Я., СИБСТРИН, Новосибирск
Титов А.В., НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ/СПбГУ, Санкт-Петербург
Фёдоров А.С., ИФ СО РАН/СФУ, Красноярск
Фёдоров М.В., Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва
Филиппов А.В., ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Норман Г.Э.,
Стегайлов В.В.,
Тимофеев А.В.
Кондратюк Н.Д.

ЛОКАЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Харабуа Б.А., 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://jiht.ru/afon22>

Под редакцией

Г. Э. Нормана, В. В. Стегайлова, А. В. Тимофеева, Н. Д. Кондратюка

Благодарим В.В. Писарева, Г.С. Смирнова, Д. Ю. Флейту, М.А. Орехова за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

В сборнике представлены тезисы докладов 18-го Российского симпозиума «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 15-26 августа 2022 г.). Симпозиумы 2015-2022 гг. являются продолжением серии симпозиумов по проблемам физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах, проводившихся в 2003-2013 годы.

Как и в 2015-2021 гг., специфика Симпозиума предполагает рассмотрение широкого круга 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, инженерным наукам и computer science. Симпозиум даёт прекрасную возможность для проведения научных дискуссий в неформальной обстановке, появления коопераций среди учёных.

Оригинальные доклады в 2022 г. включаются в программу по следующим темам:

- 1) конденсированное состояние,
- 2) свойства органических веществ,
- 3) жидкости и наножидкости,
- 4) квантовые явления,
- 5) низкотемпературная плазма.

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

<u>Абдуллина Д.У., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</u> Осаждение атомов и распыление при нормальном падении, моделируемое цепочкой Френкеля-Конторовой	4
<u>Барташевич Е.В., Созыкин С.А., Юшина И.Д.</u> Природа тетрельных связей и их роль в формировании устойчивых взаимодействий в многокомпонентных системах на основе углеродных материалов	4
<u>Белкин А.А., Рафальская Т.А., Рудяк В.Я.</u> О реологических свойствах жидкостей и наножидкостей	5
<u>Брюханов В.М., Байдаков В.Г., Проценко С.П.</u> Кавитация в леннард-джонсовских растворах: молекулярно-динамическое моделирование	6
<u>Варламова Л.А., Ларионов К.В., Сорокин П.Б.</u> Квантово-химическое исследование структуры и стабильности наноразмерных алмазных пленок, пассивированных кислородсодержащими группами.	7
<u>Гергега В.А., Суслов А.В., Степанов Р.С.</u> Одноосная деформация кристаллов висмута	8
<u>Губин С.А., Губина Т.В.</u> Молекулярно-динамическое моделирование критических значений давлений ударных волн для начала химического разложения органических веществ	9
<u>Гуда А.А., Медведев П.В., Солдатов А.В., Русалев Е.В.</u> Создание микрофлюидной системы синтеза с машинным обучением	10
<u>Дещеня В.И., Кондратюк Н.Д., Ланкин А.В., Норман Г.Э.</u> Моделирование водных растворов сахаров методом молекулярной динамики	10
<u>Дмитриев С.В.</u> Делокализованные и пространственно локализованные нелинейные колебания модельных и кристаллических решеток	10
<u>Казаков А.М., Бабичева Р.И., Дмитриев С.В., Корзникова Е.А.</u> Моделирование взаимодействия дислокаций с препятствиями в ОЦК решетке вольфрама	11
<u>Камаева Л.В., Рылъцев Р.Е., Щелкачев Н.М.</u> Химический ближний порядок, вязкость и затвердевание расплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni	11
<u>Кондратюк Н.Д.</u> Квантовая природа ядер через интегралы по траекториям в молекулярной динамике	12
<u>Савин А.В., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</u> Механика и нелинейная динамика графеновых нанолент на подложке	12
<u>Ланкин А.В.</u> Физические принципы извлечения лития из бедных рассолов	13
<u>Лукьянчук В.Г., Ланкин А.В., Норман Г.Э.</u> Молекулярно-динамическое моделирование хлорсодержащего двойного слоистого гидроксида алюминия и лития	14
<u>Норман Г.Э., Саитов И.М.</u> О новом классе фазовых переходов первого рода	15
<u>Писарев В.В., Лозунов М.А., Кондратюк Н.Д., Никитюк Б.И.</u> Структурные и транспортные свойства углеводородных жидкостей	15
<u>Полякова П.В., Баимова Ю.А.</u> Анализ влияния морфологии скомканного графена на его механические свойства: атомистическое моделирование	16
<u>Решетняк О.Б., Решетняк В.В., Филиппов А.В.</u> Взаимодействие углеродных наночастиц с алюминием в жидком и кристаллическом состояниях	16
<u>Решетняк В.В., Решетняк О.Б., Филиппов А.В.</u> Кинетика рождения и гибели ион-молекулярных комплексов в плазме влажного воздуха	17
<u>Русалев Ю.В., Гуда А.А.</u> Моделирование механических свойств поверхности методом молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF	17
<u>Савилов Т.М., Ланкин А.В., Смирнов Г.С., Норман Г.Э.</u> Влияние параметров системы на коэффициент диффузии диоксида циркония	18
<u>Смирнов Г.С.</u> Структура железа в условиях внутреннего ядра Земли: классическая и квантовая молекулярная динамика	18
<u>Собалев С.А., Матвейчук Ю.В., Борисова П.И., Барташевич Е.В.</u> Особенности электронных характеристик кристаллов с отрицательной линейной сжимаемостью	19
<u>Сорокина Л.Ю., Варламова Л.А., Сорокин П.Б.</u> Теоретическое изучение стабильности окисленного нитрида бора	19
<u>Степанов Р.С., Гергега В.А., Колобов А.В.</u> Влияние одноосного сжатия на Ван-дер-Ваальсову щель в двумерных халькогенидах	20
<u>Фёдоров А.С., Еремкин Е.В., Высотин М.А.</u> Моделирование плазмонов с переносом заряда в системах из металлических наночастиц на поверхности графена.	20
<u>Филиппов А.В.</u> Потенциал взаимодействия сферических макрочастиц-диэлектриков с сильно отличающимися радиусами	21
<u>Флейта Д.Ю.</u> Температура стеклования и межчастичная динамика биметаллических сплавов на основе никеля	21
<u>Флягина И.С., Марков А.А., Малков А.И.</u> Бориды алюминия Al ₁₁ 28B и AlB ₂ : изучение энергетики образования в контексте системы Al-B с помощью DFT моделирования	22
<u>Цыганков А.А., Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.</u> Структурно-динамические особенности расплава жидкого висмута: DFT анализ	22
<u>Шепелев И.А., Колесников И.Д., Дмитриев С.В.</u> Динамика возбуждения и распространения ударной волны в слое фосфорена	23
<u>Шутикова М.И., Стегайлов В.В.</u> Расчет свойств точечных дефектов магнетита в рамках теории функционала плотности	23
ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	24

Осаждение атомов и распыление при нормальном падении, моделируемое цепочкой Френкеля-Конторовой

Абдуллина Д.У.¹, Корзникова Е.А.², Дмитриев С.В.¹

¹УФИЦ РАН,²УГАТУ, Уфа

dina.abdullina25@gmail.com

Численно моделируется удар молекулы из атомов К со скоростью V о свободный конец цепи Френкеля-Конторовой. В зависимости от значений K и V наблюдаются разные сценарии взаимодействия молекулы с цепью. Интересно, что коэффициент распыления Y как функция V демонстрирует немонотонную зависимость. Это объясняется тем, что сверхзвуковые краудионы могут иметь дискретный набор скоростей распространения. Когда V таково, что эффективно возбуждаются сверхзвуковые краудионы, последние передают энергию вглубь цепочки, и распыление минимально. Полученные результаты качественно объясняют физику бомбардировки поверхности кристалла атомными кластерами. Краудионы могут двигаться по плотным атомным рядам с дозвуковой и даже сверхзвуковой скоростью. Сверхзвуковые краудионы (или антикинки) изучались с помощью одномерных решеток Клейна-Гордона [1], двумерных решеток Морса и ГЦК-решеток. Движущиеся краудионы переносят массу и энергию, играя важную роль в структурных превращениях материалов при высокоэнергетических ударах.

Цепь Френкеля-Конторовой [2] использовалась для изучения переноса массы краудионами, инициируемого ударом молекулы о конец цепи. Было показано, что молекуле требуется гораздо меньше энергии для инициирования краудионов в цепи по сравнению с одиночным атомом.

В данной работе эта же модель используется для анализа модификации поверхности кристалла при ударе молекулы при различных значениях скорости удара V и числа атомов в молекуле К.

Мы сосредоточимся на анализе числа осажденных или распыленных атомов. Будет показано, что очень важную роль в этих процессах играет образование сверхзвуковых одиночных и/или множественных краудионов.

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение №075-03-2022-318/1) молодёжная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» для Д.У.А. (проведение расчетов), гранта НШ- 4320.2022.1.2 для Е.А.К. (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ 21-12-00229 для С.В.Д. (постановка задачи, концептуализация исследования).

1. Savin A. V. Supersonic regimes of motion of a topological soliton. J. Exp. Theor. Phys. – 1995. – V. 81. P. 608.
2. Dmitriev S. V., Korznikova E. A. and Chetverikov A. P. Supersonic N-crowdions in a two-dimensional Morse crystal. J. Exp. Theor. Phys. – 2018. – V. 126. P. 347-352.

Природа тетрельных связей и их роль в формировании устойчивых взаимодействий в многокомпонентных системах на основе углеродных материалов

Барташевич Е.В.* , Созыкин С.А., Юшина И.Д.

ЮУрГУ, Челябинск,

*bartashevichev@susu.ru

Поиск эффективных материалов для концентрирования и удаления токсичных отходов и загрязнителей из окружающей среды чрезвычайно актуален. Огромную роль при решении этих задач играют многокомпонентные соединения на основе углеродных материалов. Также велика роль соединений подгруппы углерода в задачах разработки функциональных материалов для авиационно-космической отрасли.

Физико-химические свойства соединений на основе подгруппы углерода во многом контролируются нековалентными связями с их участием. В нашей работе мы исследуем природу слабых нековалентных взаимодействий, называемых тетрельными связями TtB [1], в которых атомы 14-й подгруппы Периодической таблицы предоставляют для связывания свою электрофильную область.

Квантово-химические расчеты на основе теории функционала плотности позволили проанализировать электронные характеристики взаимодействий, сформированных галогенид-ионами F^- , Cl^- , Br^- с тетраэдрическими молекулами: $Y-TtX_3 \dots Hal^-$; при этом варьировались как тетрельный атом, предоставляющий для нековалентного связывания свою электрофильную область $Tt = C, Si, Ge, Sn, Pb$; так и ковалентно связанные с ним атомы.

Методы неорбитальной квантовой кристаллографии [2] позволили разработать электронные критерии, призванные характеризовать свойства нековалентных связей подгруппы углерода в наноразмерных и периодических системах и были применены на следующем шаге моделирования углеродных поверхностей, взаимодействующих с фрагментами полимеров на основе эпоксидиановых смол. Расчёты проводились с учетом периодических граничных условий, использовались программы Siesta, CRYSTAL17.

Показано, что тетрельные связи играют важную роль при взаимодействиях кислородных групп полимера с углеродными атомами поверхности. Представленная методология открывает потенциальную возможность анализа свойств химических связей на уровне электронной плотности в многомасштабном моделировании многокомпонентных материалов.

Работа ведется в рамках проекта РНФ № 22-13-00170.

О реологических свойствах жидкостей и наножидкостей

Белкин А.А.* , Рафальская Т.А., Рудяк В.Я.

НГАСУ, Новосибирск,

*a.belkin@sibstrin.ru

Для многих жидкостей, например красок или полимеров, характерна неньютоновская реология, вызванная, в частности разрывом полимерных цепочек [1]. Однако при высоких скоростях сдвига зависимость вязкости от скорости сдвига может становиться нелинейной даже для обычных жидкостей [2]. Это важно учитывать для описания свойств течений в микро- и наноканалах и тонких пленках. Изменение реологии может быть вызвано и добавлением в жидкость наночастиц [3]. Причины такого изменения в этих случаях пока не выявлены, хотя попытки сделать это известны [4]. Исследование методом молекулярной динамики механизмов изменения реологии гомогенных жидкостей при высоких скоростях сдвига и наножидкостей являлось основной целью работы. Были изучены зависимости от скорости сдвига коэффициентов переноса и структурных свойств аргона и бензола, а также наножидкостей на их основе.

Необходимые характеристики определялись в МД-модели классического течения Куэтта. Моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [5], взаимодействие молекул жидкости описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, наночастиц - потенциалом Рудяка-Краснолуцкого [6]. В отличие от жидкого аргона, который вплоть до скоростей сдвига 10^{11} 1/с остается ньютоновской жидкостью, коэффициент вязкости бензола после 10^9 1/с начинает снижаться, он описывается псевдопластичной моделью. В то же время для наножидкостей на их основе в обоих случаях характерна псевдопластичная реология. Добавление наночастиц приводит к увеличению вязкости для малых скоростей сдвига [7], увеличение их концентрации – к снижению предельной скорости сдвига, при которой меняется характер реологии. Изменение реологии сопровождается изменением структуры жидкости, что демонстрируют рассчитанные радиальные функции распределения. Об этом же свидетельствует и установленное различие коэффициентов диффузии молекул жидкости для различных ее состояний. Дальнейшее повышение скорости сдвига приводит к снижению влияния наночастиц на реологические свойства базовых жидкостей.

Работа выполнена при поддержке гранта 20-19-00043 Российского научного фонда.

1. Виноградов Г. В., Малкин А. Я. Реология полимеров. М.: Химия, 1977.
2. Evans D.J., Morriss G.P. Statistical mechanics of nonequilibrium liquids. Canberra: ANU E Press, 2007.
3. Minakov A.V., Rudyak V.Y., Pryazhnikov M.I. // Heat Transfer Engineering. 2021. V.42. N.12. P.1024.
4. Devarajan D.S., Nourian P., McKenna G.B., Khare R. // Journal of Rheology. 2020. V.64. P.529.
5. Thompson A.P., et al. // Comp Phys Comm. 2022. V.271. P.108171.
6. Rudyak V.Y., Krasnolutskii S.L. // Proc. of 21st Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics 1999. V.I. P.263.
7. Rudyak V.Y., Belkin A.A, Krasnolutskii S.L. Molecular dynamics modeling transport processes of fluids and nanofluids in bulk and nanochannels // In Book: Advances in Molecular Dynamics Simulations Research. 2021.

Кавитация в леннард-джонсовских растворах: молекулярно-динамическое моделирование

Брюханов В.М.*, Байдаков В.Г., Проценко С.П.

ИТФ УрО РАН, Екатеринбург,

*svetlana@itpuran.ru

Методом молекулярной динамики (МД) исследовано зарождение парогазовых пузырьков в растянутых (перегретых) леннард-джонсовских растворах с частичной (система A , метан-водород) и полной (система B , метан-азот) растворимостью компонентов. Расчеты проведены в NVT -ансамбле при температуре T , близкой к температуре тройной точки растворителя (первый компонент). Постоянство температуры обеспечивал термостат Нозе-Гувера [1]. Параметры потенциала межчастичного взаимодействия ε_{11} , σ_{11} и масса частицы m_1 первого компонента использовались для приведения рассчитываемых величин к безразмерному виду. Давление насыщения p_s , ортобарические плотности и поверхностное натяжение γ_∞ определены в двухфазной МД модели с плоской межфазной границей жидкость-пар. Мольная доля растворенного вещества x в жидкой фазе растворов варьировалась от 0 до 0.2. Частота зародышеобразования в растянутой жидкости J рассчитана методом среднего времени жизни [2] в однофазной МД модели. Давление в критическом пузырьке p'_* определено из условия его вещественного равновесия с окружением. При $T = 0.7$ и давлениях во внешней фазе ниже -0.6 значение p'_* в системе B не превышает 0.002. Давление в критическом пузырьке раствора A составило 0.067 и 0.165 при концентрации летучего компонента в жидкой фазе раствора 0.1 и 0.2, соответственно.

Данные по J сопоставлены с результатами классической теории зародышеобразования (CNT) в предположении, что сдерживающим фактором роста кавитационной полости является сила вязкости, а поверхностное натяжение критического зародыша не зависит от его размера. При частоте зародышеобразования $J = 2 \cdot 10^{-7}$ предельные растяжения $\Delta p = p_s - p$ раствора B меньше рассчитанных из CNT. Когда $x = 0.2$, растяжения $\Delta p^{MD} = 0.64$, а $\Delta p^{CNT} = 0.93$. В растворе A значения Δp , полученные при МД моделировании, превышают теоретические, если $x > 0.14$. При $x = 0.2$ $\Delta p^{MD} = 0.73$, а $\Delta p^{CNT} = 0.61$. Чтобы согласовать результаты моделирования и CNT нужно принять, что поверхностное натяжение есть функция радиуса критического зародыша $\gamma(R_*)$. Когда $x = 0.2$, величина $\gamma(R_*)$ для раствора A должна быть на 23 % больше, а для раствора B на 22 % меньше, чем на плоской межфазной границе.

Установлены качественные отличия в формировании и росте парогазового пузырька в растворах A и B . В растворе A зарождение новой фазы начинается с появления неоднородности, в центре которой парциальная плотность первого компонента примерно в 7 раз меньше, а второго в 3 раза больше, чем парциальные плотности ее окружения. Полная плотность раствора в центре неоднородности при этом понижается примерно в два раза. Фазовый распад раствора B отличается от распада раствора A тем, что на его начальном этапе плотность второго компонента в пузырьке остается близкой к плотности окружающей фазы. Плотность растворителя и, как следствие, раствора в месте формирования пузырька понижается примерно в 1.9 раза. Рост парогазовых пузырьков завершается формированием устойчивых (равновесных) конфигураций пузырек-раствор. В системе A равновесный пузырек содержит преимущественно частицы второго компонента, в то время как в системе B он практически пуст.

Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда 18-19-00276-П. При проведении расчетов был использован суперкомпьютер «Уран» ИММ УрО РАН.

1. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford: Oxford university press, 2017.
2. Baidakov V.G., Bobrov K.S. // J. Chem. Phys. 2014. V.140. P.184506.

Квантово-химическое исследование структуры и стабильности наноразмерных алмазных пленок, пассивированных кислородсодержащими группами.

Варламова Л.А. , Ларионов К.В., Сорокин П.Б.*

МИСиС, Москва,

**varlamova.la@misis.ru*

Диаманты, представляющие из себя квазидвумерную пленку из двух атомарных слоев углерода, и обладающие алмазоподобной структурой, являются одним из перспективных современных наноразмерных материалов. Их выдающиеся механические свойства, например, делают их потенциально перспективными для создания композитных материалов, а электронные свойства так же потенциально применимы в оптике и электронике.

Одним из путей получения диамантов является их синтез из биграфена путем химически индуцированного фазового перехода. Процесс протекает за счет изменения поверхностной энергии таких структур путем химической сорбции на поверхность биграфена различных функциональных групп, из-за чего разрушается самосопряженная электронная система графена, атомы углерода переходят из sp^2 в sp^3 гибридное состояние и графеновые листы связываются между собой в алмазную пленку.

Важно заметить, что от взаимной ориентации слоев биграфена исходной структуры и схемы осаждения пассивирующих функциональных групп зависит способ связывания исходных листов графена друг с другом и структура получаемого в результате диаманта – она может быть как кубической, так и гексагональной.

В данной работе мы изучили структуру и электронные свойства алмазных пленок, функционализированных гидроксильными и пероксидными группами, а также атомами водорода.

Мы рассмотрели осаждение гидроксильных и пероксидных групп, а также атомов водорода на биграфен упаковки AA', и осаждение гидроксидов и атомов водорода на биграфен упаковки AB. В результате работы было показано, что осаждение кислорода в эпоксидной форме не дает необходимого вклада в изменение поверхностной энергии и поэтому дальнейшего связывания не происходит. Кроме того, было показано, что сорбция чистого кислорода из воздуха на графен является невыгодным процессом. Показано, что алмазная пленка полностью пассивированная кислородом в пероксидной форме, нестабильна даже при сверхнизких температурах. Так же показано, что алмазные плёнки, покрытые водородом стабильны примерно до 400К, а гидроксильными до 950К в случае образования кубической фазы для биграфена упаковки AB и 250К и 800К для гексагональной фазы.

Так же были изучены случаи пассивации двумя разными группами, было показано, что янусовые структуры, с пассивацией поверхностей разными видами групп, энергетически невыгодны, в то время как структуры с одной и той же стехиометрией пассивирующих поверхностей стабильны. Для таких структур построены фазовые диаграммы и показано, что смешивание разных функциональных групп возможно практически в любой стехиометрии, что потенциально может позволить варьировать свойства полученных структур путем изменения состава их покрытия. Так же изучены электронные свойства таких алмазных пленок и показано, каким образом они изменяются при изменении стехиометрии покрытий.

Работа выполнена за счёт финансовой поддержки Российского научного фонда (проекта №21-12-00399).

Одноосная деформация кристаллов висмута

Гергега В.А.*, Суслов А.В., Степанов Р.С.

РГПУ, Санкт-Петербург,

gerega.vasilisa96@gmail.com

Висмут имеет малое непрямоe энергетическое перекрытие экстремумов валентной зоны и зоны проводимости, вследствие чего, уже небольшие деформации кристаллической решетки приводят к заметным изменениям зонного спектра и, соответственно, транспортных свойств. Это особенно актуально при исследовании свойств тонких пленок висмута. Дело в том, что пленка находится на подложке, которая в общем случае имеет коэффициент температурного расширения (КТР) отличный от КТР материала пленки и испытывает механическую деформацию при температуре, отличной от температуры формирования. С учетом того, что преимущественная кристаллографическая ориентация пленок висмута имеет направление оси СЗ перпендикулярно подложке, деформация, возникающая в пленке, соответствует растяжению или сжатию в тригональной плоскости, что можно представить деформацией сжатия или растяжения вдоль оси СЗ. Величина и знак деформации определяется разницей КТР материалов пленки и подложки [1]. С другой стороны, в пленочном состоянии возможно получение значительных деформаций, при которых массивный кристалл разрушается. Использование деформации открывает возможности для плавной подстройки зонного спектра для наблюдения и исследования бесщелевого состояния и, возможно, состояния топологического изолятора.

При анализе удельного сопротивления, магнетосопротивления и коэффициента Холла пленок висмута на подложках с различным КТР в двухзонном приближении мы получили, что при деформации растяжения (КТР подложки меньше, чем КТР висмута) происходит уменьшение величины перекрытия, а при растяжении – его увеличение [2]. Однако, двухзонное приближение, по-видимому, недостаточно полно отражает особенности энергетической структуры висмута.

В связи с этим, как первый этап, мы решили проанализировать изменения зонной структуры при деформации кристаллической решетки висмута методами DFT с использованием пакета CASTEP. Размах относительной деформации, возникающей в пленках висмута на кремнии и NaCl при температуре жидкого азота (температура формирования принята равной температуре отжига – 523 К) составляет порядка 1 %, однако может быть увеличен при дополнительной механической деформации подложки. Ввиду этого в расчетах выбран диапазон деформации ± 5 % вдоль оси СЗ. Расчеты из первых принципов выполнены с помощью пакета моделирования CASTEP в рамках теории функционала плотности в плосковолновом базисе методом PAW. Для расчета выбраны функционалы GGA-PBE и сохраняющий норму псевдопотенциал, при этом учитывалось спин-орбитальное взаимодействие. Оптимизация структуры проводилась при фиксированном значении деформированного параметра с гексагональной ячейки с помощью алгоритма TPSD.

Согласно проведенным расчетам при деформации сжатия по тригональному направлению энергетическое перекрытие в точках L и T уменьшается, а при деформации растяжения – увеличивается. В окрестности деформации сжатия на 2 % перекрытие в точках T и L практически исчезает. При изменении деформации происходит монотонное увеличение ширины запрещенной зоны в точке T, в то время как в точке L – немонотонное с максимумом в области 1 % сжатия. При значительном увеличении деформации сжатия, актуализируется новый экстремум зоны проводимости, находящийся между точками G и T, что также может вносить вклад в появление более «тяжелых» электронов проводимости.

Дальнейшим этапом исследований представляются попытки исследования релаксации механических напряжений в пленочном кристалле, а также расчеты зонной структуры пленок висмута.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-22-00850.

1. Грабов В.М., Демидов Е.В., Комаров В.А., Суслов А.В., Суслов М.В. // Письма ЖТФ 2018. V.44. N.11. P.71.
2. Суслов А.В., Грабов В.М., Комаров В.А., Демидов Е.В., Сенкевич С.В., Суслов М.В. // ФТП 2019. V.53. N.2. P.616.

Молекулярно-динамическое моделирование критических значений давлений ударных волн для начала химического разложения органических веществ

Губин С.А.^{*1,2}, Губина Т.В.²

¹НИЯУ МИФИ, ²ИХФ РАН, Москва,

*SAGubin@mephi.ru

Изучение разложения органических веществ в ударных волнах важно для понимания закономерностей химических реакций, проходящих при очень быстром нагреве при высоких давлениях и степенях сжатия. Особое значение такие исследования имеют для органических энергоёмких соединений, для которых важно понимание механизма возбуждения взрыва при ударно-волновом воздействии. В таких опытах обычно находят критические величины давления ударных волн, при которых начинается химическое разложение вещества. Для этого выполняются экспериментальные и теоретические исследования, среди которых количество публикаций по молекулярно-динамическому (МД) моделированию возрастает с каждым годом. Это объясняется высокой информативностью реакционного МД моделирования, которое позволяет рассчитывать не только критические значения ударных волн, но и последовательность образования промежуточных продуктов, скорости химических реакций и значения энергий активации, необходимые для нахождения кинетических механизмов разложения изучаемых материалов в условиях быстропотекающих процессов при высоких давлениях и температурах, труднодоступных для экспериментальных исследований.

Результаты МД моделирования сравниваются с экспериментальными значениями критических величин давления необходимых для начала разложения органических веществ в ударных волнах, создаваемых разрядами мощных лазеров. Для регистрации параметров ударных волн, генерируемых разрядами лазеров, за последние два десятилетия разработаны разные бесконтактные экспериментальные методики, позволяющие на коротких базах 0.1-0.5 мм за очень короткие времена 60 – 300 пс проводить точные измерения параметров ударных волн и регистрировать начало химического разложения вещества [1].

Доказательством достоверности МД расчетов критических значений давления начала химического разложения органических веществ в ударных волнах служит согласие величин критических давлений ударных волн, предсказанных на основе МД расчетов, с экспериментальными данными, полученными в опытах по возбуждению ударных волн разрядами лазеров. При этом оказалось, что для инициирования химических реакций при пикосекундных измерениях требуется более высокое ударно-волновое давление, чем получаемое при наносекундных регистрациях, с ударными волнами, создаваемыми метанием металлических пластин взрывами энергетических веществ или выстрелами газовых пушек.

В свою очередь, критические величины ударных волн, предсказанные с применением МД моделирования, оказываются заметно выше экспериментальных значений, полученных в опытах с протяженными ударными волнами, возбуждаемыми взрывами обычных энергетических веществ или газовыми пушками. Такое различие расчетных значений критического давления ударных волн получено для разных параметризаций реакционных силовых полей ReaxFF. Например, результаты МД моделирования, выполненные с параметризацией ReaxFF-lg [2], в многочисленных статьях по расчету критических параметров для начала разложения органических и энергетических веществ в ударных волнах согласуются с экспериментальными значениями, полученными в ударных волнах, создаваемых разрядами мощных лазеров [3, 4]. При этом полученные в МД расчетах пороговые значения давления на фронте ударных волн, оказываются заметно выше опытных величин давлений, создаваемых взрывами энергетических веществ или выстрелами газовых пушек.

В [3, 4] показано, что начало химических реакций для многих органических жидкостей, определяемое по отклонению ударной адиабаты с химическим реагированием от замороженной адиабаты (для непрореагировавшего вещества), наблюдается в пикосекундном масштабе при более высоких перепадах давления на фронтах ударных волн, генерируемых разрядами мощных лазеров, чем в экспериментах с метанием взрывом или газовой пушкой, выполняемых в длительных наносекундных и микросекундных масштабах.

Другими словами, МД расчеты предсказывают более интенсивные ударные волны для инициирования химических реакций при пикосекундных масштабах вычислений, для которых требуются более высокие значения температур и давлений ударных волн, чем при наносекундных и микросекундных регистрациях.

Следовательно, получение высоких расчетных значений температур и давлений начала разложения метана в неравновесных расчетах МД объясняется их малой длительностью и короткими расстояниями, для которых проводятся вычисления. Из-за короткой фазы сжатия ударной волны, создаваемой разрядом лазера, для начала химического разложения органических веществ требуются более интенсивные ударные волны. Скорости спада давления, температуры и плотности за фронтом таких ударных волн должны быть достаточными для начала химического разложения органических веществ.

Поэтому критическими значениями параметров ударно-волновых воздействий для начала разложения органических веществ являются не только давление на фронте, но форма и длительность фазы сжатия за фронтом ударной волны. Следовательно, для инициирования химического реагирования органических веществ за падающей ударной волной важна величина импульса ударной волны, а не только критическое значение давления на ее фронте.

1. D. S. Moore. // Journal of the Optical Society of America B 2018. 35 (10). B1.
2. Liu L., Liu Y., Zybin S.V., Sun H., Goddard III W.A. // J. Phys. Chem. A. 2011. V. 115. P.11016.
3. Brown K.E., Mcgrane S. D., Bolme C.A., Moore D.S. // J. Phys. Chem. A. 2014. V. 118. P. 2559.
4. Martínez E., Perriot R., Kober E.M. // J. Chem. Phys. 2019. V. 150. P. 244108.

Создание микрофлюидной системы синтеза с машинным обучением

Гуда А.А., Медведев П.В., Солдатов А.В., Русалев Е.В.

ЮФУ МИИ ИМ, Ростов-на-Дону,

yuri.rusalev@gmail.com

Для получения наночастиц и композитных материалов была разработана автоматизированная система микрофлюидного синтеза. Она обеспечивает стабильную непрерывную работу четырех независимых шприцевых насосов из химически стойких материалов с возможностью термостатирования микрофлюидных реакторов. Система оснащена ПО, позволяющим синхронизировать работу насосов с исследовательским оборудованием и проводить таким образом *in situ* диагностику полученных продуктов реакции. Экспериментальные данные, например спектры оптического поглощения, сравниваются с теоретическими спектрами, что позволяет определить форму и размер наночастиц на основе эффекта плазмонного резонанса. Далее алгоритм байесовой оптимизации параметров синтеза корректирует условия реакции (скорости потоков, соотношения реагентов, температуру) для получения материала с желаемым или наиболее близким к желаемому оптическим спектром. Таким образом, система самостоятельно накапливает экспериментальные данные, обучается на них и синтезирует наночастицы с желаемыми параметрами быстрее и точнее, чем методом поиска по решетке.

Вместе с тем структура сплава наночастиц был смоделирована с помощью молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF. На основе DFT расчётов был натренирован потенциал для сплава Pd/Au. С помощью метода Монте-Карло были упорядочены структуры для различных концентраций Pd и Au. Коэффициенты температурного расширения и объёмные модули упругости для полученных структур отклоняются не более чем на 10% от экспериментальных значений.

Моделирование водных растворов сахаров методом молекулярной динамики

Дещеня В.И.*, Кондратюк Н.Д., Ланкин А.В., Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва,

*deshchenia.vi@phystech.edu

Сахара играют важную роль во многих природных процессах, они входят в состав клеточной стенки растений и составляют большую часть прикорневой слизи, выделяемой корнями растений, исследование которой важно для сельскохозяйственной отрасли. Кроме того, мембраны на основе полисахаридов, в первую очередь целлюлозы, получили широкое применение в технике. Например, они используются при опреснении и очистке воды, а также могут быть использованы в электрохимических источниках тока, таких как Red/Ox элементы.

Многие задачи требуют понимания процессов, происходящих на молекулярном уровне, с чем может помочь метод молекулярной динамики. Однако, для получения корректных результатов необходимо подходящее силовое поле, воспроизводящее взаимодействия между атомами системы с хорошей точностью. Поиск такого потенциала для водных растворов сахаров является актуальной задачей [1]. Недавно вышедшая корректировка к OPLS-AA[2], уточняющая взаимодействие в конденсированных системах, является кандидатом на более точное описание сахаров в растворах.

В данной работе рассматривается модель, основанная на использовании силового поля OPLS-AA с коррекцией парциальных зарядов 1.14*CM1A на атомах в комбинации с моделью воды TIP4P/2005. Исследуется её применимость для корректного описания структурных, статических и динамических характеристик водных растворов сахаров на примере водного раствора сахарозы. Для растворов с концентрацией сахарозы от 10% до 50% при температуре от 273 К до 343 К получено хорошее согласие с доступными экспериментальными данными по плотности, коэффициентам вязкости и диффузии. Кроме того, исследуемая модель предсказывает все четыре конформации сахарозы в растворе, показанные ранее в работе [3]. Было показано, что гидродинамический радиус молекулы сахарозы не зависит от температуры раствора, а с ростом концентрации уменьшается. Это может быть связано с изменением граничных условий обтекания молекулы сахара в растворе.

Подводя итог, рассматриваемая модель показала себя в среднем лучше по сравнению с моделями водных растворов сахаров, основанных на других, в том числе уточненных специально для растворов сахарозы, силовых полях. Кроме того, данная работа дает основания считать, что OPLS-AA/1.14*CM1A может быть использовано для описания других сахаров, что представляет интерес для широкого круга задач.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 18-19-00734).

1. Jamali S.H., Westen T., Moulton O.A., Vlucht T.J.H. // J. Chem. Theory Comput. 2018. V.14. N.12. P.6690.
2. Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L. // J. Phys. Chem. B. 2017. V.121. N.15. P.3864.
3. Xia J., Case D.A. // Biopolymers. 2012. V.97. N.5. P.276.

Делокализованные и пространственно локализованные нелинейные колебания модельных и кристаллических решеток

Дмитриев С.В.

УФИЦ РАН, Уфа

dmitriev.sergey.v@gmail.com

Для нелинейных систем уравнений, описывающих динамику решеток, не существует общих методов решения, но некоторые важные для практики классы решений могут быть найдены только из анализа симметрии решеток. Теоретико-групповые подходы для решения таких задач разработаны школой Чечина Г.М. В докладе будут представлены примеры таких решений для модельных решеток и для кристаллов, а также будет продемонстрирована тесная связь между делокализованными и пространственно локализованными решениями (дискретными бризерами). Будут отмечены важные прикладные аспекты получаемых точных решений.

Работа поддержана грантом Российского научного фонда № 21-12-00229.

Моделирование взаимодействия дислокаций с препятствиями в ОЦК решетке вольфрама

Казakov А.М.^{1*}, Бабичева Р.И.², Дмитриев С.В.³, Корзникова Е.А.¹

¹УГАТУ, Уфа, ²НТУ, Сунгапу, ³УФИЦ РАН, Уфа

*arseny.m.kazakov@gmail.com

Вольфрам широко используется в качестве материала, способного выдержать условия работы в ядерных реакторах и других экстремальных условиях [1]. Под воздействием облучения в металле образуются такие дефекты, как пары Френкеля, поры и дислокационные петли. Поэтому актуальны исследования, направленные на изучение взаимодействия этих дефектов друг с другом и на изучение их влияния на механические свойства металла. Представлено теоретическое исследование, основанное на методе молекулярной динамики, целью которого является изучение механизма деформационного упрочнения ОЦК вольфрама, связанного с взаимодействием дислокаций с порами. Решение данной проблемы получено с использованием пакета LAMMPS для монокристалла определенной ориентации, в котором рассматривается скольжение краевых дислокаций в основной системе скольжения и их взаимодействие с порами. В аналогичной постановке подобная задача решалась для ОЦК железа [2]. Изучено влияние размера пор на величину сдвигающего напряжения. Рассчитаны зависимости сдвигающего напряжения от деформации сдвига в интервале температур 600-1400 К. Показано, что дислокации перерезают поры и присутствие пор приводит к повышению напряжения течения, причем, данный эффект становится более заметным с ростом диаметра пор. Для пор диаметра 6 нм напряжение течения возросло в три раза по сравнению с материалом без пор. Описан механизм взаимодействия краевых дислокаций и пор под воздействием сдвигающего напряжения.

Благодарности: исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УГАТУ» (соглашение №075-03-2022-318/1) молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях» для К.А.М. (проведение расчетов), гранта НШ-4320.2022.1.2 для Е.А.К. (анализ и обсуждение полученных результатов), гранта РНФ 21-12-00229 для С.В.Д. (постановка задачи, концептуализация исследования).

1. Golubeva A., Cherkez D. Hydrogen retention in doped tungsten materials developed for fusion (Review). Problems of Atomic Science and Technology. 2018. V. 41, pp. 26-34.
2. Bonny G., Terentyev D., Elena J., Zinovev A., Minov B., Zhurkin E.E. Assessment of hardening due to dislocation loops in bcc iron: Overview and analysis of atomistic simulations for edge dislocations. Journal of Nuclear Materials. 2016. V. 473, pp. 283-289.

Химический ближний порядок, вязкость и затвердевание расплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni

Камаева Л.В.^{*1}, Рыльцев Р.Е.², Щелкачев Н.М.¹

¹ИФВД РАН, Троицк, ²ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург,

*lara_kam@mail.ru

Методом *ab initio* молекулярной динамики получены данные о локальном химическом взаимодействии в системах с равновесными квазикристаллическими фазами Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co, а также для сравнения - в Al-Cu-Ni. Полученные результаты позволили провести анализ экспериментальных данных о концентрационном поведении вязкости и переохлаждения расплавов 3-х систем. Области концентраций для исследований были выбраны в соответствии со стехиометриями квазикристаллических фаз Al-Cu-Fe и Al-Cu-Co и их фазовыми равновесиями. Исследования в расплавах Al-Cu-Fe проводились при 12,5 ат. % Fe (от 15 до 35 ат. % Cu), в Al-Cu-Co при 15 ат. % Co (от 10 до 30 ат. % Cu) и в Al-Cu-Ni при 10 ат.% Ni (от 17 до 40 ат.% Cu).

Функции радиального распределения атомов (RDF) расплавов Al-Cu-Fe, Al-Cu-Co и Al-Cu-Ni из различных концентрационных областей, определенные методом *ab initio* молекулярной динамики, сопоставлены с данными рентгеноструктурного анализа этих расплавов. Анализ концентрационных изменений RDF, а также основных характеристик структуры позволил установить индивидуальные особенности межатомного взаимодействия в расплавах и их зависимость от содержания компонент.

Проведенные экспериментальные исследования показывают, что температурные зависимости вязкости в равновесных условиях в системе расплав – тигель – атмосфера носят монотонный характер и описываются экспоненциальными функциями. Изотермы вязкости строили по температурным зависимостям вязкости. Анализ концентрационных зависимостей вязкости показывает, что для всех систем характерно немонотонное поведение вязкости вдоль исследуемых концентрационных сечений. Изотермы имеют максимумы и минимумы. Наиболее выраженные максимумы и минимумы для системы Al-Cu-Ni менее выражены в системе Al-Cu-Fe. Показано, что изотермы вязкости хорошо согласуются с концентрационными изменениями химического параметра ближнего порядка, описывающего эффективное парное межатомное взаимодействие в жидких сплавах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № РНФ 18-12-00438).

Квантовая природа ядер через интегралы по траекториям в молекулярной динамике

Кондратюк Н.Д.

НИУ ВШЭ, Москва,

nkondratyuk@hse.ru

Обзорный доклад посвящен формулировке квантовой теории через фейнмановские интегралы по траекториям, а также применению данного метода в расчетах физико-химических свойств [1]. В докладе будут рассмотрены как теоретические аспекты интерпретации (основные понятия, вывод интегралов по траекториям через каноническую матрицу плотности и оператор эволюции времени), так и переход к численным реализациям: молекулярной динамике центроида [2] и молекулярной динамике замкнутого полимера [3]. На примерах работ будут продемонстрированы возможности метода по расчету структурных свойств [4], уравнений состояния, колебательных спектров [5], коэффициентов переноса, констант химических реакций [6]. Отдельное внимание уделено возможности данного подхода рассчитывать квантовые корреляционные функции в реальном времени. Будут представлены наши первые результаты по расчету фазовой диаграммы плотного разогретого водорода. Работа частично подготовлена в ходе проведения исследования в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ).

1. Tuckerman M. *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*. Oxford: Oxford University Press, 696 p., 2010.
2. Cao, J., Voth, G.A. // *J. Chem. Phys.* 1994. V. 100. P. 5093–5105.
3. Craig, I.R., Manolopoulos, D.E. // *J. Chem. Phys.* 2004. V. 121. P. 3368–3373.
4. Habershon, S., Markland, T.E., Manolopoulos, D.E. // *J. Chem. Phys.* 2009. V. 131. P. 024501.
5. Witt, A., Ivanov, S.D., Shiga, M., Forbert, H., Marx, D. // *J. Chem. Phys.* 2009. V. 130. P. 194510.
6. Suleimanov, Y.V., Aoiz, F.J., Guo, H. // *J. Phys. Chem. A*. 2016. V. 120. P. 8488–8502.

Механика и нелинейная динамика графеновых нанолент на подложке

*Савин А.В.¹, Корзникова Е.А.^{*2,3}, Дмитриев С.В.³*

¹ ФИЦ ХФ РАН, Москва, ² УГАТУ, ³ УФИЦ РАН, Уфа

** elena.a.korznikova@gmail.com*

В последние два десятилетия графен вызывает значительный интерес благодаря своей исключительной проводимости, механической прочности, термостойкости и т. д. Крупномасштабное производство графена обычно связано с выращиванием его слоев на подложках, и эффекты взаимодействия графена с поверхностью различных материалов являются актуальным предметом для исследования. В некоторых случаях устойчивая связь двух поверхностей может быть потеряна, что приводит к непредсказуемому изменению свойств материала и его механического поведения. В данной работе мы рассматриваем несколько типов поверхностных неустойчивостей графеновых нанолент, их динамику и влияние на механические свойства. Одним из изучаемых объектов, о котором следует упомянуть, является рипплокация - дефект поверхности складчатого типа атомарного масштаба [1]. Поверхностные и объемные неустойчивости в слоистых наноматериалах недавно привлекли внимание исследователей, поскольку они обладают свойствами топологических солитонов, способных эффективно передавать массу и энергию и опосредовать пластическую деформацию. В этом исследовании динамика графеновых рулонов, рипплокаций и некоторых других топологических возмущений на графитовой подложке анализируется с использованием полноатомной молекулярной динамики и двумерной цепной модели. Показано, что такие объекты представляют собой устойчивые солитоноподобные уединенные волны, распространяющиеся практически без излучения энергии [2]. Наши результаты способствуют пониманию поведения двумерных материалов на подложке.

Работа КЕА поддержана Советом по грантам Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации, номер гранта НШ-4320.2022.1.

1. Barsoum MW, Tucker GJ. // *Scripta Materialia*. 2017. 139, 166–172. (doi:10.1016/j.scriptamat.2017.04.002)
2. Savin AV, Korznikova EA, Dmitriev SV. // *Physical Review B*. 2020. 102. (doi:10.1103/PhysRevB.102.245432)

Физические принципы извлечения лития из бедных рассолов

Ланкин А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

alex198508@yandex.ru

Постоянное расширение области применения литиевых аккумуляторов делает литий всё более важным видом сырья, имеющего критическое значения для всё больших областей техники. Литий относится к редким и рассеянным элементам с ограниченными ресурсами. По крайней мере 2/3 его ресурсов связано с различными природными рассолами такими как рапы соленых озер и подземные минерализованные воды.

Классическая технология извлечения лития из рассолов включает в себя стадии упаривания природного рассола вплоть до выпадения из него в виде осадка основной части сопутствующих солей натрия, калия и магния, с последующим осаждением из остаточной рапы лития. Экономически эффективное упаривание растворов возможно только в регионах с аридным климатом. Кроме того, данный метод позволяет извлекать литий только при условии, если соотношение концентраций магния к литию меньше 6.

Альтернативный подход использует осаждение лития в виде ДГАЛ-Cl ($\text{LiCl}(2,5-3,0)\text{Al}(\text{OH})_3(2-4)\text{H}_2\text{O}$). Такой подход позволяет работа с сырьём, содержащим существенно большие концентрации магния в рассоле.

Наиболее привлекательными при переработке бедных рассолов с высоким содержанием магния являются подходы, которые не требуют ни предварительного концентрирования растворов путём упаривания, ни предварительного извлечения магния, позволяя извлекать литий напрямую из добываемого рассола. Сейчас существует три класса таких перспективных технологий.

Первой группой технологий, позволяющих напрямую извлекать литий из бедных рассолов, является его экстракция растворами хлорида железа совместно с ТБФ в органических растворителях. Альтернативой смеси хлорида железа и ТБФ при экстракции могут быть селективно связывающиеся с литием краун-эфиры.

Второй группой технологий прямого извлечения лития является его абсорбция на неорганических абсорбентах. Наиболее перспективными такими абсорбентами являются оксид марганца и гидратированный оксид титана. Оба абсорбента имеют исключительно высокую селективность по отношению к литию. Однако, стабильность оксидов марганца в водных растворах недостаточна. Титановый абсорбент обладает существенно лучшей стабильностью, но недостаточной абсорбционной ёмкостью и скоростью абсорбции.

Третья группа технологий основана на применении мембран селективно-проницаемых для лития и непроницаемых для других ионов в процессах обратного осмоса или электродиализа. Ключевой проблемой развития данного направления является создание новых материалов мембран с высокой селективностью по отношению к литию. Существующие сейчас полимерные материалы пока имеют недостаточную селективность. В связи с этим перспективным тут представляется направление создания “жидких мембран”, т.е. промежуточного слоя органической жидкости, через который идёт перенос ионов в процессе электродиализа. Если в полимерной мембране могут присутствовать макроскопические поры, наличие которых снижает селективность, то в слое жидкости их заведомо не может быть. Это позволяет потенциально получать селективность “жидких мембран” существенно больше, чем при использовании твердых. Органическая жидкость “жидких мембран” может представлять собой растворы краун-эфиров в несмешивающихся с водой ионных жидкостях.

В докладе будет сделан обзор различных технологий извлечения лития из природных рассолов и рассмотрено место молекулярно-динамического моделирования для их усовершенствования и поиска новых подходов к извлечению этого дефицитного вида сырья.

Исследование выполнено при поддержке гранта РНФ (18-19-00734).

Молекулярно-динамическое моделирование хлорсодержащего двойного слоистого гидроксида алюминия и лития

Лукьянчук В.Г.* , Ланкин А.В., Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва,

*lukianchuk.vg@phystech.edu

Гидроксид алюминия имеет множество применений, среди которых выделяется способность сорбировать различные вещества из воды. Форма хлорсодержащего двойного гидроксида алюминия и лития (ДГАЛ-С1) способна к обратимой сорбции лития из воды, содержащей его соли [1], что позволяет его использовать для извлечения лития из геотермальных вод.

Этот метод добычи лития имеет ряд существенных преимуществ, к которым относятся высокая селективность над побочными ионами такими как ионы магния, натрия и кальция, низкая стоимость и отсутствие токсичных выбросов [1]. Однако относительно низкая устойчивость ДГАЛ-С1 не позволяет на данный момент применить это вещество в промышленности [1]. Тем не менее, Wu L. et al. [2] показали, что допирование ионами железа повышает термодинамическую стабильность ДГАЛ-С1, что говорит о возможности дальнейшей модификации структуры вещества для повышения эффективности процесса сорбции лития, в чём может помочь метод молекулярной динамики.

Квантово-механические расчеты методом функционала электронной плотности достаточно хорошо себя показывают при моделировании двойных слоистых гидроксидов [3]. Но практическая возможность их использования при моделировании интерполяции лития в структуру гидроксида алюминия из водных растворов ограничена высокими вычислительными затратами при использовании *ab initio* молекулярной динамики. Моделирование данного процесса может быть выполнено в рамках классического метода молекулярной динамики, что требует существенно меньших вычислительных затрат. Однако, расчеты методом классической молекулярной динамики для ДГАЛ-С1 были крайне затруднены из-за отсутствия подходящего потенциала [4]. Это создает потребность в поиске потенциалов, позволяющих достаточно точно моделировать данный процесс.

В данной работе было проведено молекулярно-динамическое моделирование ДГАЛ-С1 с использованием программного пакета LAMMPS. Для моделирования был использован модифицированный потенциал ClayFF [5], в котором были изменены эффективные заряды атомов. Для вычисления новых эффективных зарядов был использован алгоритм DDEC6, реализованный в программном пакете Chargemol Program [6]. Квантово-механические расчеты для оптимизации положений атомов и расчета электронной плотности проводились в Quantum Espresso.

В результате полученная молекулярно-динамическая модель соответствует экспериментальной и сохраняется с течением времени, что говорит о ее применимости для дальнейшего изучения путей модификации ДГАЛ-С1.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Научного Фонда №18-19-00734 (РНФ-28).

1. Paranthaman M.P., Li L., Luo J., Hoke T., Ucar H., Moyer B.A., Harrison S. // Environ. Sci. Technol. 2017. V.51. N.22. P.13481.
2. Wu L., Li L., Evans S.F., Eskander T.A., Moyer B.A., Hu Z., Antonick P.J., Harrison S., Paranthaman M.P., Riman R., Navrotsky A. // J. Am. Ceram. Soc. 2018. V.102. N.5. P.2398.
3. Costa D.G., Rocha A.B., Diniz R., Souza W.F., Chiaro S.S.X., Leitão A.A. // J. Phys. Chem. C. 2010. V.114. N.33. P.14133.
4. Lombardo G.M., Pappalardo G.C., Punzo F., Costantino F., Costantino U., Sisani M. // Eur. J. Inorg. Chem. 2005. V.2005. N.24. P.5026.
5. Cygan R.T., Liang J.J., Kalinichev A.G. // J. Phys. Chem. B. 2004. V.108 N.4. P.1255.
6. Manz T.A., Limas N.G. // RSC Adv. 2016. V.6. N.53. P. 47771.

О новом классе фазовых переходов первого рода

Норман Г.Э.* , Саитов И.М.

НИУ ВШЭ, Москва,

*gnorman@hse.ru

1. Химическая модель. Плазменный фазовый переход (ПФП) [1] предсказан в рамках трёхкомпонентной модели. В уравнениях состояния и ионизационного равновесия учитывались кулоновское взаимодействие между электронами и ионами и их короткодействующее эффективное квантовое отталкивание, атомы считались идеальным газом. При высоких неидеальностях система теряла устойчивость и расслаивалась на две фазы. Ван-дер-Ваальсов вид имела зависимость концентрации атомов от концентрации зарядов. Фазовое равновесие свелось к равенству концентраций атомов двух фаз.

Биберман и Норман [2] рассмотрели метастабильные состояния, порождаемые ПФП, и обнаружили их аномальный характер. Имеют место сильные перекрытия по объёму стабильной ветви одной фазы и метастабильной ветви другой на изотерме зависимости давления от объёма. В области перекрытия изотерма, в силу своего наклона, оказывается трехзначной функцией (три значения давления соответствуют одному значению объёма), в отличие от однозначной изотермы Ван-дер-Ваальса. В работе [3] аналогичная особенность обнаружена при исследовании фазового перехода, обусловленного диссоциацией молекул. Это позволило авторам [3] предложить объединить плазменный и диссоциационный фазовые переходы в новый класс фазовых переходов первого рода.

Другой особенностью, заслуживающей выделения ПФП в новый класс фазовых переходов, является то, что давление *уменьшается* по мере приближения к критической точке, в то время как в уравнении Ван-дер-Ваальса давление, наоборот, *увеличивается* по мере приближения к критической точке. Линия сосуществования фаз ПФП выглядит как длинный, изогнутый и узкий язык, который довольно сложно надёжно ограничить снизу и определить положение критической точки. Эта картина имеет место как в химической модели, так и при расчётах ТФП для флюида водорода [4].

2. ТФП. К этой же задаче был применён метод теории функционала плотности (ТФП) [4]. Этот современный подход часто называют ab initio несмотря на содержащиеся в нём приближения. ТФП – это огромный шаг по сравнению с химической моделью. Однако между этими двумя подходами при описании фазового перехода флюид-флюид в разогретом плотном водороде с помощью ТФП и при описании ПФП в рамках химической модели есть важная принципиальная общность.

В обоих случаях имеет место скачок плотности, и он сопровождается скачком ионизации. Последнее в ТФП проявляется как скачок электропроводности, в химической модели – как увеличение скачком концентрации зарядов и степени ионизации. Эта внутренняя общность между результатами описания фазового перехода в рамках двух подходов привела и к качественной общности принципиальных результатов. В рамках ТФП подтверждены особенности, предсказанные химической моделью, которые мы обсуждали выше.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. Норман Г. Э., Старостин А. Н. // ТВТ. 1968. Т.6. N.3. С.410.
2. Биберман Л. М., Норман Г. Э. // ТВТ. 1969. Т.7. N.5. С.822.
3. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. // ЖЭТФ. 2022. Т.161. N.3. С.238.
4. Норман Г. Э., Саитов И. М. // УФН. 2021. Т.191. N.11. С.1153.

Структурные и транспортные свойства углеводородных жидкостей

Писарев В.В.*¹, Логунов М.А.², Кондратьев Н.Д.², Никитюк Б.И.³

¹НИУ ВШЭ, Москва, ²ОИВТ РАН, Москва, ³МФТИ, Долгопрудный,

*vpisarev@hse.ru

Представлены результаты молекулярно-динамического моделирования углеводородных жидкостей. Изучалась вязкость жидкостей в свободном состоянии и в нанопорах глинистых минералов размера от 3 до 7 нм.

Для моделирования углеводородов использовался потенциал OPLS-AA/CM1A [1], для моделирования глинистых минералов – ClayFF [2]. Получены зависимость вязкости от плотности при постоянной температуре для н-пентана и н-додекана в свободном пространстве и в нанопорах. Показано, что стеснение не меняет существенно кривую вязкость-плотность для метана, но сдвигает эту кривую для додекана.

Для н-додекана обнаружен эффект образования жидкокристаллической структуры при повышении плотности в порах пиррофиллита. Оценены параметры упорядочения в зависимости от плотности жидкости и ширины поры.

Для н-пентана, н-додекана и 1,1-дифенилэтана исследована связь транспортных коэффициентов со структурными свойствами жидкости. В качестве структурной характеристики рассмотрена парная энтропия, предложен способ ее вычисления для молекулярных жидкостей, дающий согласие между парной энтропией и термодинамической избыточной энтропией. Продемонстрирована универсальность в зависимостях обезразмеренной вязкости от обезразмеренной энтропией между потенциалами OPLS-AA и COMPASS [3].

Исследование выполнено при поддержке Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. Dodda L.S., Vilseck J.Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W.L. // J. Phys. Chem. B. 2017. V.121. N. 15. P. 3864.
2. Sygan R.T., Greathouse J.A., Kalinichev A.G. // J. Phys. Chem. C. 2021. V.125. N.32. P.17573.
3. Sun H. // J. Phys. Chem. B. 1998. V.102. N.38. P.7338.

Анализ влияния морфологии скомканного графена на его механические свойства: атомистическое моделирование

Полякова П.В.^{1,2}, Баимова Ю.А.²

¹ УГНТУ, ² ИПСМ РАН, Уфа,

polina.polyakowa@yandex.ru

Углеродные структуры обладают уникальными механическими характеристиками, являются сверхлегкими материалами, имеют хорошие проводящие свойства, в результате чего могут быть использованы в различных областях промышленности. Одним из таких материалов является скомканный графен, который представляет собой трехмерную структуру, состоящую из смятых графеновых чешуек, связанных между собой силами Ван-дер-Ваальса. В данной работе методом атомистического моделирования исследовано влияние морфологии скомканного графена на его механические свойства.

Все расчеты проводились с использованием программного пакета LAMMPS и межатомного потенциала AIREBO. Постоянство температуры (300 К) в системе контролировалось с помощью термостата Носе-Хувера. Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. В качестве начальных структур выбраны две различные морфологии скомканного графена: монодисперсная структура – чешуйки одной и той же формы, одинакового размера, и полидисперсная – чешуйки разных размеров и формы. Единичным элементом для монодисперсной структуры является графеновая чешуйка, состоящая из 252 атомов углерода, вырезанная из углеродной нанотрубки диаметром около 1 нм. Для полидисперсной морфологии структурный элемент значительно сложнее и состоит из чешуек разного размера и формы. Для получения структуры скомканного графена двух морфологий применяется гидростатическое сжатие ($\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = \varepsilon$) при 300 К. Для исследования влияния морфологии структуры на механические свойства проводится одноосное растяжение вдоль осей x , y и z с постоянной скоростью деформации 0.005 пс^{-1} .

Показано, что монодисперсная структура имеет почти в два раза большую критическую деформацию и предел прочности, что связано с тем, что в процессе гидростатического сжатия все чешуйки объединились в более однородную структуру, а одинаковая форма чешуек позволила получить гораздо больше sp^3 -связей на краях. Однако, полидисперсная структура скомканного графена является изотропной, что также является важным преимуществом.

Взаимодействие углеродных наночастиц с алюминием в жидком и кристаллическом состояниях

Решетняк О. Б.*, Решетняк В. В., Филиппов А. В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

*obr@triniti.ru

Изготовление и исследование свойств алюмоматричных композитов наполненных углеродными наночастицами представляет значительный интерес [1]. Ключевыми при этом являются вопросы обеспечения адгезии между матрицей и наполнителем, распределения наночастиц в объеме матрицы и равномерного распределения наночастиц в матричном материале. Обозначенные вопросы во многом определяются процессами на границах между фазами матрицы и наполнителя, в исследовании которых значительную роль играют методы атомистического моделирования.

В настоящей работе выполнено многомасштабное атомистическое исследование межфазного взаимодействия между алюминием и углеродными наночастицами различной морфологии: графитом, графеном, углеродными нанотрубками и фуллереноподобными частицами различных диаметров. Выполнено сравнение с экспериментами [2,3]. Показано, что потенциал взаимодействия существенно зависит от локального окружения атомов углерода и алюминия. Тем не менее возможно использование упрощенной модели: взаимодействие атомов Al – C описывается с использованием потенциала Леннарда-Джонса, параметры которого линейно зависят от средней кривизны поверхности частицы.

На примере фуллеренов C_{60} изучен процесс коагуляции наночастиц в расплаве алюминия. Показано, что теория Смолуховского не описывает кинетику процесса, занижая константу скорости коагуляции примерно на 2 порядка. Результаты исследования позволяют сделать вывод о взаимодействии фуллеренов в расплаве алюминия под действием поверхностных сил и об активационном характере коагуляции.

Проведено исследование влияния интерфейса на сжимаемость гетерогенной системы Al – C_{60} . Показано, что несмотря на слабую сжимаемость фуллеренов C_{60} , объемный модуль которых согласно [4] более чем в 10 раз превышает объемный модуль алюминия, увеличение концентрации фуллеренов в расплаве ведет к увеличению сжимаемости неоднородной среды. Для объяснения этого эффекта предложена аналитическая модель, учитывающая изменение энергии при деформации межфазной границы.

Настоящая работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (соглашение с ОИВТ РАН №075-15-2020-785).

1. Hu Y., Shenderova O.A., Hu Z., Padgett C.W., Brenner D.W. // Reports on Progress in Physics. 2006. V.69. N.6. P.1847.
2. Oh S.-I., Lim J.-Y., Kim Y.-C., Yoon J., Kim J.-H., Lee J., Sung Y.-M., Han J.-H. // Journal of Alloys and Compounds. 2012. V.542. P.111.
3. Hamza A.V., Dykes J., Mosley W.D., Dinh L., Balooch M. // Surface Science. 1994. V.318. N.3. P.368.
4. Khabibrakhmanov A., Sorokin P. // Carbon. 2020. V.160. P.228.

Кинетика рождения и гибели ион-молекулярных комплексов в плазме влажного воздуха

Решетняк В.В.*, Решетняк О.Б., Филиппов А.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

*victor.reshetnyak84@gmail.com

Актуальность исследования плазмохимических процессов во влажном воздухе обусловлена важностью этих процессов для физики атмосферы, проблемы климата и экологической безопасности. Существенную роль в этих процессах играют гидратированные ионы. В настоящей работе вычислены значения констант скорости рождения и гибели комплексов $H^+(H_2O)_n$ с числами n от 2 до 8. Считалось, что распад комплексов в воздухе инициируется столкновениями с молекулой N_2 .

Расчеты выполнены с использованием различных моделей и приближений, включая *ab initio* и полуэмпирические методы. Вычисления *ab initio* осуществлялись в программе Orca [1] с учетом обмена и корреляции электронов методами Хартри-Фока и MP2. Внутримолекулярные движения при расчете статистических весов, чисел и плотности состояний считались гармоническими. Результаты сопоставлялись с экспериментальными данными [2]. Константы скорости реакций распада комплексов вычислялись в рамках теории Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (РРКМ) [3]. Частота столкновений комплексов с молекулами N_2 вычислялась по ланжевенновскому сечению.

Для проверки применимости принятых допущений было выполнено моделирование распада комплексов методом молекулярной динамики (МД). Расчет выполнялся с использованием полуэмпирического метода GFN2-xTB [4]. В отличие от модели РРКМ, при МД расчет гармоническое приближение не используется. При этом квантовый характер движения атомов учтен не был. Сопоставление результатов вычислений методом МД с расчетами методом РРКМ в классическом и квантовом пределе позволяют оценить погрешности, вызванные использованием указанных приближений.

Результаты вычислений сравнивались с данными [5], где были обобщены результаты экспериментов при низких давлениях буферного газа и предложены результаты вычислений для предела высоких давлений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госкорпорации "Росатом" (Государственный контракт от 20.04.2021 №Н.4з.241.09.21.1069).

1. Neese F. // WIREs Computational Molecular Science. 2012. V.2. N.1. P.73.
2. Kebarle P., Searles S.K., Zolla A., Scarborough J., Arshadi M. // Journal of the American Chemical Society. 1967. V.89. N.25. P.6393.
3. Робинсон П., Холбрук К. Мономолекулярные реакции. Москва: Мир, 1975.
4. Bannwarth C., Ehlert S., Grimme S. // Journal of Chemical Theory and Computation. 2019. V.15. N.3. P.1652.
5. Sieck L.W., Heron J.T., Green D.S. // Plasma Chemistry and Plasma Processing. 2000. V.20. N.2. P.235.

Моделирование механических свойств поверхности методом молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF

Русалев Ю.В.*, Гуда А.А.

ЮФУ МИИ ИМ, Ростов-на-Дону

*albion96@mail.ru

В настоящей работе была разработана методика численного наноиндентирования металлических пленок с различной степенью кристалличности методом молекулярной динамики с потенциалом ReaxFF. Степень разупорядочения структуры варьировалась с помощью кратковременного нагрева образца выше температуры плавления и последующего резкого охлаждения. Для четырех образцов были получены кривые нагрузки-разгрузки в численном эксперименте по наноиндентированию со сферическим индентором радиусом 10.5 Å. Было показано, что скачки нагрузки на кривых соответствуют появлению протяженного дефекта, соответствующего образованию трещины и выдавливанию материала пленки индентором из кратера на поверхность. Из кривых была получена глубина области неупругой деформации поверхности, а также рассчитан модуль Юнга методом Оливера-Фара. С ростом концентрации дефектов модуль Юнга уменьшается от 353 ГПа для идеально кристаллической пленки до 81 ГПа для аморфной пленки. Полученные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными по наноиндентированию дефектных микроструктур кобальта, а методика численного моделирования открывает новые перспективы компьютерного дизайна новых материалов нанопокрывтий для получения заранее заданных механических и трибологических свойств.

Влияние параметров системы на коэффициент диффузии диоксида циркония

Савилов Т. М. , Ланкин А. В., Смирнов Г. С., Норман Г. Э.*

ОИВТ РАН, Москва,

**savilov.tm@gmail.com*

Диоксид циркония используется в водородной энергетике для электролиза из-за высокой проводимости и тугоплавкости [1]. В связи с этим представляет интерес его компьютерное моделирование и дальнейшее предсказание свойств новых материалов.

Для базовой системы использовался потенциал Борна-Кулона, моделирование происходило в программном пакете LAMMPS.

Было обнаружено [2], что использование модели с наличием эффекта поляризации ионов изменяет получаемые результаты. Суть модели заключается в разделении ионов на тяжёлое ядро и лёгкую оболочку. Их заряды имеют разные знаки, взаимодействие в пределах одной пары происходит согласно уравнению гармонического осциллятора. Все измерения проводились как с учётом поляризации, так и без учёта.

Также при выводе на равновесии системы с учётом эффекта поляризации можно настроить термостат таким образом [3], чтобы относительная скорость ядер и оболочек не изменялась под его действием. Оба варианта термостата использовались и сравнивались. Получено, что в системе, где термостат не меняет относительную скорость, скорости оболочек циркония значительно ниже.

Исследован размерный эффект для монокристаллического диоксида циркония. Для системы более чем с 10 тысячами атомов изменения коэффициента диффузии достигают минимальных значений.

Использована система бикристалла [4] для исследования влияния границы на коэффициент диффузии. Получено, что наличие границы увеличивает коэффициент диффузии системы. Также исследована зависимость от размеров монокристаллических зёрен.

Проведено моделирование для различных температур, проведено сравнение с экспериментальными данными. Получено, что учёт поляризации в целом улучшает предсказательные способности системы.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№18-19-00734).

1. Радченко Р.В., Мокрушин А.С., Тюльпа В.В., Водород в энергетике. Уч. пос. - Екатеринбург: Изд. Уральского универ., 2014
2. Savilov T. M., Lankin A. V. and Norman G. E. J. Phys.: Conf. Ser. 1787 012011 2021
3. P J Mitchell and D Fincham 1993 J. Phys.: Condens. Matter 5 1031
4. Савилов Т.М. 2021 Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ, с. 513-514

Структура железа в условиях внутреннего ядра Земли: классическая и квантовая молекулярная динамика

Смирнов Г. С.

НИУ ВШЭ, Москва,

grsmrnov@gmail.com

Кристаллическая структура железа, которое составляет основную часть внутреннего ядра Земли, неизвестна при условиях внутреннего ядра Земли. Экспериментальные и теоретические данные по фазовой диаграмме железа при таких экстремальных условиях противоречивы. Классическая молекулярная динамика использовалась для вычисления свободной энергии ОЦК, ГПУ и жидких фаз. Свободные энергии ионов были откорректированы на величину электронной энтропии, вычисленной для модели погруженного атома. Использование такого метода дает температуру плавления ГПУ фазы, совпадающую с первопринципными расчетами. Это позволяет верифицировать методику для ОЦК фазы, где аналогичные вычисления невозможны из-за проблем сходимости по размеру системы. Результирующая фазовая диаграмма показывает стабилизацию ОЦК фазы в условиях внутреннего ядра Земли.

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

Особенности электронных характеристик кристаллов с отрицательной линейной сжимаемостью

Собалев С.А.* , Матвейчук Ю.В., Борисова П.И., Барташевич Е.В.

ЮУрГУ, Челябинск,

*sobalevs@susu.ru

Информация о механических характеристиках кристаллов, в том числе тензоре жёсткости, позволяет прогнозировать изменения кристаллических структур под воздействием внешнего гидростатического давления. Кристаллы с отрицательной линейной сжимаемостью (ОЛС) при подобном воздействии проявляют уникальное механическое поведение: расширение в одном или нескольких пространственных направлениях. Описание ОЛС в терминах электронной плотности необходимо для прогнозирования механических свойств кристаллов на основе их электронных характеристик.

Для описания влияния анизотропии электронного распределения на механические свойства кристаллов лучше всего подходит функция квантового электронного давления $QEP(r)$ [1, 2]. Физически $QEP(r)$ характеризует изменение средней внутренней энергии при локальной деформации, изменяющей объем небольшого элемента электронного континуума без изменения его формы.

$$QEP(r) = \frac{2}{3}g(r) - \frac{1}{4}\nabla^2\rho(r) - \frac{1}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \rho(r)^{\frac{4}{3}}$$

Анализ функции квантового электронного давления вдоль направлений с минимальной и максимальной линейной и одноосной сжимаемостью в кристаллах, для которых наблюдается ОЛС (формиат кальция и резорцин) показал следующее. При гидростатическом сжатии $QEP(r)$ изменяется неоднородно: в направлении минимальной линейной сжимаемости наблюдаются области, в которых функция существенно меняет свои значения, в то время как в других направлениях она может оставаться практически неизменной. Таким образом, характер изменения $QEP(r)$ отражает анизотропию сопротивления кристаллов с ОЛС внешнему воздействию.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 20-03-00240).

1. Tao J., Vignale G., Tokatly I.V. // Phys. Rev. Lett. 2008. V.100. P.206405.
2. Tsirelson V.G., Stash A.I., Tokatly I.V. // Acta Cryst. B. 2019. V.75. P.201–209.

Теоретическое изучение стабильности окисленного нитрида бора

Сорокина Л.Ю.* , Варламова Л.А., Сорокин П.Б.

МИСиС, Москва,

*l.sorokina@misis.ru

До сих пор нет полного понимания, как именно происходит окисление нитрида бора. Если в случае графена окисление происходит в основном за счет сорбции кислорода на поверхность в той или иной форме, то для нитрида бора более характерно встраивание кислорода в решетку в позицию азота [1,2,3,4]. Однако, в работах [5,6,7,8] показано, что при адсорбции молекулярного кислорода на поверхность нитрида бора на подложке Ni(111) при низких температурах кислород не диссоциирует, а связывается в форме пероксида. В работе [9] показано, что гидроксильная группа также может успешно прививаться на поверхность h-BN. Поэтому в данной работе мы рассмотрели различные варианты модификации h-BN кислородом и оценили их зависимость от температуры. Мы показали, что при наличии водорода в системе кислород будет преимущественно осаждаться в виде –ОН групп. Такая структура стабильна до достижения высоких температур, а после происходит интеркаляция кислорода в решетку нитрида бора. При наличии вакансионных дефектов по азоту интеркаляция может проходить уже при температурах около 400 К.

В случае отсутствия источника водорода до температуры 300 К кислород садится на поверхность нитрида бора без диссоциации, в форме пероксида. И только при достаточно высоких температурах (~900 К) происходит интеркаляция кислорода в идеальный нитрид бора.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (Соглашение № 21-79-10411)

1. Simonov K.A. et al. // Surf. Sci. 2012. Vol. 606, № 3. P. 564–570.
2. Vinogradov N.A. et al. // J. Phys. Chem. C. American Chemical Society, 2011. Vol. 115, № 19. P. 9568–9577.
3. Shevelev V.O. et al. // Nanotechnology. 2019. Vol. 30, № 23.
4. Meng C. et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2018. Vol. 20, № 16. P. 11013–11020.
5. Späth F. et al. // J. Phys. Chem. C. 2020. Vol. 124, № 33. P. 18141–18146.
6. Späth F. et al. // Chem. - Eur. J. 2019. Vol. 25, № 37. P. 8884–8893.
7. Späth F. et al. // 2D Mater. IOP Publishing, 2017. Vol. 4, № 3. P. 035026.
8. Lyalin A. et al. // J. Phys. Chem. C. American Chemical Society, 2013. Vol. 117, № 41. P. 21359–21370.
9. Zou Q. et al. // Carbohydr. Polym. 2021. Vol. 266. P. 118127.

Влияние одноосного сжатия на Ван-дер-Ваальсову щель в двумерных халькогенидах

Степанов Р.С.^{*}, Гереза В.А., Колобов А.В.

РГПУ им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург

*step-rom-serg@mail.ru

Энергонезависимая память, в частности память с фазовым переходом (PCM), в настоящее время является ключевым элементом различных электронных и портативных систем. Класс Ван-дер-Ваальсовых (ВдВ) материалов играет существенную роль в реализации PCM благодаря на порядок большей скорости переключения и меньшему энергопотреблению по сравнению с устройствами на основе сплавов [1]. Реконфигурация щели ВдВ ведет к заметному изменению зонной структуры, что приводит к большому контрасту сопротивлений между состояниями SET и RESET [2,3]. Можно разумно предположить, что при коллапсе щели ВдВ и установлении ковалентных связей между образующими щель атомами, т.е. за счет приложения одноосного напряжения, произойдет переход 2D-3D, и свойства материала резко изменятся.

Чтобы проверить эту возможность, мы исследовали влияние одноосного сжатия на структурную модификацию двумерных халькогенидов (исследованы Sb₂Te₃ и GaSe). Моделирование проводилось с использованием теории функционала плотности, реализованной в коде CASTEP. Мы обнаружили, что, вопреки интуиции, связи халькоген-халькоген через ВдВ щель не образовывались при сжатии. Вместо этого в GaSe структура резко изменилась, сохранив при этом двумерный характер. Аналогичные расчеты для Sb₂Te₃ также показали, что щель ВдВ не может быть закрыта сжатием вдоль оси с. Мы приписываем наблюдаемую неспособность индуцировать 2D-3D-переход сильной антисвязывающей природе электронов, расположенных внутри щели ВдВ.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 22-19-00766.

1. R.E.Simpson, P. Fons, A.V. Kolobov, et al., Nature Nanotech 6, (2011) 501
2. A.V. Kolobov, P. Fons, Y. Saito, J. Tominaga, ACS Omega 2 (2017) 6223
3. Y. Saito, A.V. Kolobov, P. Fons et al., Appl. Phys. Lett. 114 (2019) 132102

Моделирование плазмонов с переносом заряда в системах из металлических наночастиц на поверхности графена.

Фёдоров А.С.^{*1}, Еремкин Е.В.², Высотин М.А.¹

¹ИФ СО РАН, ²СФУ, Красноярск,

*qchem99@yandex.ru

В последние годы поверхностные плазмоны (ПП), представляющие собой колебания электромагнитного поля, распространяющиеся вдоль проводящей поверхности, привлекают большое внимание благодаря их многочисленным приложениям: в сверхчувствительных оптических биосенсорах модели [1], метаматериалах, квантовой обработке информации [2] и др. Однако даже благородные металлы, широко применяемые для генерации ПП плазмонов, демонстрируют большие омические потери, что ограничивает их применимость в оптических устройствах. В качестве альтернативы выступает графен ввиду его уникальных электронных и механических свойства, а также существования в нем носителей в виде фермионов Дирака, которые могут перемещаться на микроны без рассеяния даже при комнатной температуре. На основе развития оригинальной гибридной модели [3,4], где были исследованы плазмоны с переносом заряда (Charge Transfer Plasmon -СТР) в системах, состоящих из металлических наночастиц, соединенных проводящими одномерными линкерами, в данной работе исследуются СТР в системах из металлических наночастиц, лежащих на проводящей поверхности графена. СТР в таких комплексах возникают из-за баллистического движения электронов в графене, обладающем почти чисто мнимой оптической проводимостью при малом рассеивании электронов. При этом данная гибридная модель учитывает кинетическую E_{kin} и потенциальную энергию E_{pot} электронов в графене и наночастицах. В отличие от систем, где наночастицы соединяются проводящими линкерами, в таких системах движение носителей осуществляется по континууму различных путей вдоль силовых линий переменного электрического поля. При этом, благодаря возможности смещения уровня Ферми в графене при его допировании путем прикладывания смещающего потенциала, можно эффективно изменять оптическую проводимость графена и эффективно изменять частоты СТР в таких системах. В работе исследованы частоты СТР в системах, где на поверхности графена лежит одна металлическая наночастица, две наночастицы или их комплексы. Получены зависимости частот СТР в данных системах от их геометрии и от величины допирования графена.

Работа была поддержана фондом РФФ N18-13-00363 и Государственной Программой Министерства науки и высшего образования РФ, Проект No. FSRZ-2020-0008.

1. Rodríguez-Lorenzo, L. Alvarez-Puebla, R. A. Pastoriza-Santos, Mazzucco, Stephan, O. Kociak, M. Liz-Marzan, L. M. García de Abajo, F. J. J. Am. Chem. Soc. 2009, 131, 4616–4618
2. Gonzalez-Tudela, A. Martin-Cano, D. Moreno, E. Martin-Moreno, L. Tejedor, C. Garcia-Vidal, F., J. Phys. Rev. Lett. 2011, 106, 020501.
3. Charge-transfer plasmons with narrow conductive molecular bridges A quantum-classical theory, The Journal of Chemical Physics, 2019-12-28
4. Charge transfer plasmons in the arrays of nanoparticles connected by conductive linkers, AS Fedorov, MA Visotin, VS Gerasimov, SP Polyutov, PA Avramov, The Journal of Chemical Physics 154 (8), 084123, 2020

Потенциал взаимодействия сферических макрочастиц-диэлектриков с сильно отличающимися радиусами

Филиппов А.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,
fav@triniti.ru

При моделировании термодинамических и транспортных свойств неидеальной комплексной плазмы, которая является удобным объектом для изучения экстремальных состояний вещества, методом интегральных уравнений жидкости или методом молекулярной динамики требуется потенциал взаимодействия заряженных макрочастиц, который значительно отклоняется от кулоновского на малых расстояниях. Рассмотрению задачи о взаимодействии двух заряженных диэлектрических частиц сферической формы посвящено большое количество работ (см. работы [1-3] и цитированную в них литературу). При этом в большинстве работ рассматривается однородное распределение свободного заряда по поверхностям взаимодействующих частиц и совсем редки работы, в которых рассматривается неоднородное распределение свободного заряда. Эта задача особенно актуальна в случае субмикронных частиц, заряд которых составляет всего несколько элементарных зарядов [4]. В последние годы интенсивно изучаются системы из активных частиц [5-7], среди которых системы, состоящие из так называемых Янус-частиц - сферических частиц, часть поверхности которых покрыты материалом с другими физическими/химическими свойствами, чем основной материал частицы. Такие частицы за счет различного характера взаимодействия "атомов" среды при столкновении с их поверхностью с различными физическими/химическими свойствами могут увеличивать/уменьшать свою кинетическую энергию. При этом диэлектрические свойства таких частиц в различных областях также оказываются разными и изучение из электростатического взаимодействия представляет определенный интерес.

Настоящая работа посвящена изучению электростатического взаимодействия двух заряженных частиц сферической формы, одна из которых имеет металлическое ядро, покрытое тонким слоем диэлектрика. Особое внимание уделено решению задачи в случае сильно отличающихся радиусов частиц. Эта задача в работах [2, 3] решалась с использованием бисферической системы координат, в которой решение задачи с диэлектрической пленкой невозможно. Поэтому в настоящей работе для решения задачи используется метод разложения по мультипольным моментам в двух сферических системах координат с полюсами в центрах частиц. Предложен метод суммирования рядов, медленно сходящихся в случае сильно различных радиусов частиц и в случае малой толщины диэлектрической пленки. Исследовано влияние отношения радиусов на скорость сходимости задачи. Проведены расчеты силы взаимодействия для различных отношений радиусов, значений диэлектрической проницаемости частиц и разных толщин диэлектрической пленки на металлическом ядре частицы большего размера. В дополнение к случаю изолированного ядра с нулевым зарядом рассмотрен случай, когда металлическое ядро поддерживается под определенным потенциалом.

Работа выполнена при финансовой поддержке Госкорпорации "Росатом" (Государственный контракт от 20.04.2021 №Н.4з.241.09.21.1069).

1. Муниров В.Р., Филиппов А.В. // ЖЭТФ. 2013. Т.144. №4(10). С.931.
2. Филиппов А.В. // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т.115, №3/ С.197.
3. Филиппов А.В. // ЖЭТФ. 2022. Т.161. №5. С.691.
4. Filippov A.V., Chen X., Harris C., Stace A.J., Besley E. // J. Chem. Phys. 2019. V.151. P.154113.
5. Bechinger C., Di Leonardo R., Löwen H., Reichhardt C., Volpe G., Volpe G. // Rev. Mod. Phys. 2016, V.88. N.4. P. 045006.
6. Walther A., Müller A.H.E. // Chem. Rev. 2013. V. 113. P. 5194.
7. Lisin E.A., Vaulina O.S., Lisina I.I., Petrov O.F. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2021. V.23. P.16248.

Температура стеклования и межчастичная динамика биметаллических сплавов на основе никеля

Флейта Д.Ю.

НИУ ВШЭ, Москва,
fleyta.du@phystech.edu

Процессы переноса частиц в плотных расплавах происходят в силу сильно коллективных явлений. Это позволяет прогнозировать их физические свойства на основе их структурно-временных свойств. Изучение температуры витрификации в различных соединениях определяет их применимость и важно для материаловедения.

В данной работе обсуждается зависимость коэффициентов само- и взаимодиффузии и поведения определенных корреляторов от температуры и процентного соотношения в составе расплавов. Ранее было показано, что определенные пространственно-временные характеристики отражают характеристики процесса переноса и стеклования [1]. Данный вид определения величины температуры стеклования и её изменения сравнивался с экспериментальными данными для аналогичных систем [2,3].

Анализ межчастичных взаимодействий демонстрирует обнаруженную ранее в эксперименте [4] и МД-моделировании [5] аналогичную зависимость парциальных функций от процентного состава сплавов, достигающую насыщения при изменении качественного характера коллективного переноса частиц расплава.

Исследование выполнено с использованием суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ и ОИВТ РАН. Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. Fleita D., Norman G., Pisarev V. // J. Phys.: Condens. Matt. 2020. V.32. P.214009.
2. Kuhn P., Horbach J., Kargl F., Meyer A., Voigtmann T. // Phys. Rev. B. 2014. V.90. P.024309.
3. Nowak B., Holland-Moritz D., Yang F., Voigtmann T., Evenson Z., Hansen T., Meyer F. // Phys. Rev. B. 2017. V.96. P.054201.
4. B. Nowak B., Holland-Moritz D., Yang F., Voigtmann T., Kordel T., Hansen T., Meyer F. // Phys. Rev. Mat. 2017. V.1. P.025603.
5. Fleita D.Iu., Norman G. E., Pisarev V, V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V.1147. P. 012015.

Бориды алюминия Al₁₁.28B и AlB₂: изучение энергетики образования в контексте системы Al-B с помощью DFT моделирования

Флягина И.С.^{1*}, Марков А.А.², Малков А.И.¹

¹ИФХЭ РАН, ²ИОНХ РАН, Москва

*irina.fliagina@gmail.com

Бориды металлов, в особенности бориды алюминия, находят применение в качестве энергетических материалов в виде присадок в различных видах топлива и взрывчатых веществах. Бориды алюминия AlB₂ и AlB₁₂ являются наиболее известными и изученными, однако сравнительно недавно было открыто существование фазы с составом Al₁₁.28B, полученной методом ионной имплантации бора в алюминий [1].

Эффективность боридов алюминия в качестве энергетических материалов можно оценить по их энтальпии образования. Однако, точное определение термодинамических свойств боридов алюминия экспериментальными методами чрезвычайно трудно и даже невозможно в связи с нестехиометрическим составом этих соединений, а также с неизбежным наличием примесей других фаз в исследуемых образцах. Так, для хорошо известной фазы AlB₂ экспериментальные оценки энтальпии образования варьируются в пределах -1,8...-17,6 ккал/моль. В связи с этим, данная работа посвящена теоретическому вычислению энергии образования AlB₂ и недавно открытой фазы Al₁₁.28B, которая до настоящего времени еще ни разу не была исследована теоретически.

Все расчеты были выполнены в программе Quantum Espresso [2] с использованием функционала PBE в рамках обобщенного градиентного приближения (GGA) в сочетании с псевдопотенциалом типа PAW при нулевой температуре и без учета поправки нулевой энергии со следующими параметрами: порог энергии 60 Ry, порог волновой функции 240 Ry, k-точки 4×4×4.

Для расчета энергии образования фазы Al₁₁.28B были использованы недавно полученные кристаллографические данные [3], на основе которых было построено несколько ячеек с разным соотношением Al:B и атомной заселенностью, моделирующих переменный состав фазы Al₁₁.28B: (а) Al₁₃B₃₀ (Al₁₁.267B), (б) Al₁₃B₂₉ (Al₁₁.345B), (в) Al₁₃B₂₈ (Al₁₁.276B) и (г) Al₁₃B₂₇ (Al₁₁.357B). Помимо ячеек, моделирующих фазу Al₁₁.28B, была проведена серия расчетов для ячеек, моделирующих процесс ионной имплантации атомов B в решетку fcc Al. Были изучены четыре разных способа внедрения B в Al.

Полученная нами расчетная энергия образования AlB₂, равная -3,6 ккал/моль, практически совпадает с теоретической оценкой -3,8 ккал/моль, полученной другими авторами [4]. В отличие от AlB₂, расчетная энергия образования Al₁₁.28B эндотермическая и варьируется в сравнительно узких пределах 4,9±0,3 ккал/моль, при этом практически не зависит от соотношения Al:B, а также от атомной заселенности.

Расчетные энергии образования были представлены в виде энергетической фазовой диаграммы. В соответствии с экспериментальными данными о чрезвычайно низкой растворимости B в Al, полученная нами фазовая диаграмма демонстрирует, что ионная имплантация B в Al требует преодоления значительного энергетического барьера в несколько десятков ккал/моль. Основываясь на предположении о том, что фаза Al₁₁.28B образуется именно из ионно-имплантированных атомами B алюминия, наблюдаемый экспериментально экзотермический эффект при ее образовании соответствует значительному понижению энергии на фазовой диаграмме.

1. R. G. Vardiman, "Microstructures in Aluminium Ion Implanted with Boron and Heat Treated," Acta Met. mater, vol. 40, no. 5, pp. 1029–1035, 1992.
2. P. Giannozzi et al., "QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials," J. Phys. Condens. Matter, vol. 21, no. 39, 2009.
3. A. I. Malkin, V. V. Chernyshev, A. A. Ryazantseva, A. L. Vasiliev, M. S. Nickolsky, and A. A. Shiryayev, "Formation and characterization of an Al-rich metastable phase in the Al-B phase diagram," J. Appl. Crystallogr., vol. 54, no. 4, pp. 1121–1126, 2021.
4. M. J. van Setten and M. Fichtner, "On the enthalpy of formation of aluminum diboride, AlB₂," J. Alloys Compd., vol. 477, no. 1–2, pp. 12–13, 2009.

Структурно-динамические особенности расплава жидкого висмута: DFT анализ

Цыганков А.А.* , Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

К(П)ФУ, Казань,

*tsigankov.artiom@yandex.ru

Тенденции в свойствах жидкого висмута вызывают множество вопросов с точки зрения теории жидкости, поскольку в нем имеются аномалии с точки зрения существующих экспериментальных данных. Результаты экспериментов показывают, что в радиальной функции распределения и статическом структурном факторе жидкого висмута имеется плечо в области первого пика, не характерное для классических жидкостей [1, 2], причем это наблюдается и для других элементов 15 группы периодической таблицы [3].

Поскольку радиальная функция распределения является относительной характеристикой вероятности найти частицу на определенном расстоянии относительно другой частицы, то можно сделать вывод, что данная особенность может возникнуть только в том случае, если частицы притягиваются друг к другу на малое расстояние по сравнению с его размерами (порядка от 3.2 до 4.6 ангстрем) и образуют устойчивую связь. Такими же особенностями обладает жидкий галлий, структура которого описывается в рамках модели плотноупакованных мягких квазисфер [4].

Показано методом ab-initio моделирования молекулярной динамики, что подобный эффект можно наблюдать непосредственно при компьютерной симуляции, что дает возможность прямого анализа явления теоретическими методами. Также в расплаве жидкого висмута реализуются структуры различного типа.

Работа поддержана Фондом развития теоретической физики и математики "БАЗИС".

1. Waseda Y., Suzuki K. // Phys. Stat. Sol. (b). 1972. V.49. P.339.
2. Greenberg Y., Yahel E., Caspi E. N., Benmore C., Beuneu B., Dariel M. P., Makov G. // EPL. 2009. V.86. P. 36004.
3. Jones R. O., Ahlstedt O., Akola J., Ropo M. // Jour. Chem. Phys. 2017. V.146. P.194502.
4. Mokshin A. V., Khusnutdinov R. M., Galimzyanov B. N., Brazhkin V. V. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V.22. P.4122.

Динамика возбуждения и распространения ударной волны в слое фосфорена

Шепелев И.А.^{1}, Колесников И.Д.¹, Дмитриев С.В.²*

¹ СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, ² УФИЦ РАН, Уфа

*igor_sar@li.ru

Ударные волны в твердом теле возникают в результате экстремального непрерывного сжатия материала. Распространение ударных волн в твердых телах по сравнению с газами имеет свои особенности, которые обусловлены различиями во внутреннем строении твердых тел, с одной стороны, и газов — с другой. Силы взаимодействия между атомами и молекулами твердых тел в отличие от газов велики. Сжимаемость твердых тел мала. По этой причине скорость среды за фронтом ударной волны много меньше скорости самой волны. Распространение ударных волн в двумерных наноматериалах изучено гораздо меньше, чем в объемных кристаллах. Методами молекулярной динамики моделируется и анализируется возбуждение и распространение ударных волн в монослойном черном фосфорене. Ударная волна инициируется поршнем, движущимся с постоянной скоростью. Анализируются динамические характеристики распространения ударной волны в кристаллической решетке вдоль двух кристаллографических направлений: кресла и зигзага во времени и в зависимости от скорости поршня. Подробно изучена эволюция структуры фосфорена во времени при сжатии. Эти результаты способствуют пониманию нелинейной динамики ударной волны в двумерных материалах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержке молодых ученых – кандидатов наук, грант № МК-891.2022.1.2.

Расчет свойств точечных дефектов магнетита в рамках теории функционала плотности

Шутикова М.И. , Стегайлов В.В.*

ОИВТ РАН, Москва,

*shutikova.mi@phystech.edu

Создание DFT+U модели точечных дефектов магнетита требует, во-первых, верификации поправки U , используемой для описания сильных электронных корреляций, во-вторых, значительных вычислительных ресурсов для рассмотрения множества дефектных конфигураций и учета релаксации структуры, связанной с их образованием.

В докладе будут представлены свойства наиболее интересных типов катионных дефектов кубической фазы магнетита, полученные в рамках статического DFT+U подхода. Ограничения статической модели при описании дефектов кубической фазы магнетита будут обсуждаться. Будет показан характер изменений, наблюдаемых в ходе оптимизации бездефектной ионной конфигурации при снятии симметрии кубической фазы с ионных координат, и их связь с наблюдаемым в магнетите переходом Вервея.

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

ГНЦ РФ ТРИНИТИ — Государственный научный центр РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Троицк,
ИПСИМ РАН — Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа,
ИТФ УрО РАН — Институт теплофизики Уральского отделения РАН, Екатеринбург,
ИХФ РАН — Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, Москва,
ИФ СО РАН — Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН, Красноярск,
К(П)ФУ — Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань,
МИСиС — Московский институт стали и сплавов, Москва,
МФТИ — Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный,
НГАСУ — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск,
НИУ ВШЭ — Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва,
НИЯУ МИФИ — Национальный исследовательский ядерный университет Московский инженерно-физический институт (технический университет), Москва,
НТУ — Наньянский технологический университет, Сингапур,
ОИВТ РАН — Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,
РГПУ — Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург,
РНФ — Российский научный фонд,
СГУ — Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов,
СФУ — Сибирский федеральный университет, Красноярск,
УГАТУ — Уфимский государственный авиационный технический университет, Уфа,
УГНТУ — Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
УФИЦ — Уфимский федеральный исследовательский центр РАН, Уфа,
ЮУрГУ — Южно-уральский государственный университет, Челябинск,
ЮФУ МИИ ИМ — Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов Южного федерального университета, Ростов-на-Дону