

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
16-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

«ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО
МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ»

«Foundations of Atomistic Multiscale Modeling and Simulation»

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Фортов В.Е., сопредседатель, Президиум РАН, ОИВТ РАН, Москва
Норман Г.Э., сопредседатель, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН/МФТИ, Москва
Стегайлов В.В., сопредседатель, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Тимофеев А.В., зам. председателя, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Даутия Ф.Т., зам. председателя, глава Администрации г. Новый Афон, Абхазия
Кондратюк Н.Д., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва
Орехов М.А., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, 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.

ЛОКАЛЬНЫЙ КОМИТЕТ

Миканба А.З., Новоафонская средняя школа
Полупанова М.Л., Новоафонская средняя школа
Давыдов В.Н., Новоафонская средняя школа

Веб-сайт Симпозиума <http://jiht.ru/afon19>

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

Благодарим Н. Д. Кондратюка, Д. Ю. Ленева, Р. А. Сартана и Д. Ю. Флейту за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

В сборнике представлены тезисы докладов 16-го Российского симпозиума «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 15-26 августа 2019 г.). Симпозиумы 2015-2019 гг. являются продолжением серии симпозиумов по проблемам физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах, проводившихся в 2003-2013 годы.

Как и в 2015-2018 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 включаются в программу по следующим секциям:

- 1) низкотемпературная плазма,
- 2) конденсированное состояние,
- 3) процессы переноса,
- 4) белки и биомембраны,
- 5) плазменный фазовый переход,
- 6) квантовое моделирование,
- 7) высокопроизводительные вычисления.

Заседание начинается с приглашённой тематической лекции.

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

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

Предполагается определение лучших докладчиков по номинациям:

студенты,
аспиранты,
молодые учёные.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Ланкин А.В.</i> Взгляд в будущее науки и технологии	5
Секция 1. «Плазма с конденсированной дисперсной фазой»	
<i>Куркин С.А., Дербенев И.Н., Дятко Н.А., Филиппов А.В.</i> Экранированное взаимодействие заряженных макрочастиц в многокомпонентной плазме влажного воздуха	7
<i>Николаев В.С., Тимофеев А.В.</i> Неоднородность структурных и динамических характеристик пылевой плазмы в газовом разряде	7
<i>Решетняк В.В., Филиппов А.В.</i> Свойства кристаллов и жидкости Юкавы в условиях фазового равновесия	8
<i>Родин М.М., Филиппов А.В.</i> Электростатическое взаимодействие двух заряженных диэлектрических макро-рочастиц в присутствии третьей точечной макрочастицы	8
<i>Филиппов А.В., Решетняк В.В.</i> Термодинамические потенциалы дебаевской жидкости на основе инте-гральных уравнений жидкости	9
Секция 2. «Изменение свойств вещества при быстром охлаждении или нагревании»	
<i>Кирова Е.М., Писарев В.В., Норман Г.Э.</i> Переход расплава в аморфное состояние при быстром охлажде-нии в разных ракурсах.	10
<i>Негодин В.Д., Флейта Д.Ю., Писарев В.В., Норман Г.Э.</i> Особенность коллективного поведения Леннард-Джонсовской системы в окрестности точки фазового перехода кристаллизации	10
<i>Поляченко Ю.А., Флейта Д.Ю., Писарев В.В., Норман Г.Э.</i> Изучение поведения Леннард-Джонсовской системы в окрестности точки кипения методом пространственно-временных корреляционных функций	10
<i>Флейта Д.Ю., Писарев В.В., Норман Г.Э.</i> Изучение коллективных движений в металлическом расплаве в окрестности точки кристаллизации методом пространственно-временных корреляционных функций	11
Секция 3. «Процессы переноса»	
<i>Груздков А.А., Казаринов Н.А.</i> Континуальные модели явлений переноса в дискретной среде	12
<i>Кондратюк Н.Д.</i> Предсказание вязкости жидких углеводородов для задач индустрии	12
<i>Федоров А.С., Еремкин Е.В., Соседкин О.А., Высотин М.А.</i> Изучение теплопроводности одномерных неод-нородных наноструктур	12
<i>Шарипов З.А., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Христов И.Г., Христова Р.Д., Батгэрэл Б., Тухлиев З.К.</i> Молекулярно-динамическое моделирование облучения металлов импульсными пучками ионов	13
Секция 4. «Углеводородные жидкости»	
<i>Бакуллин И.К., Кондратюк Н.Д., Ланкин А.В., Норман Г.Э.</i> Диффузия ионов в водном растворе сополи-меров этилена и этиленоксида	14
<i>Губин С.А., Козлова С.А., Маклашова И.В.</i> Термодинамические характеристики ударно-сжатого жидкого бензола в методах реакционной молекулярной динамики и равновесной термодинамики	14
<i>Ленёв Д.Ю., Писарев В.В.</i> Молекулярное моделирование конденсации в смеси метан-этан	15
<i>Логунов М.А., Орехов Н.Д.</i> Молекулярно-динамический анализ топологии переплетения линейных поли-меров в контакте с углеродными наночастицами	15
Секция 5. «Поверхности»	
<i>Григорьев Ф.В., Сулимов В.Б., Тихонравов А.В.</i> Атомистическое моделирование свойств пористых тонких пленок	16
Секция 6. «Водород под давлением»	
<i>Губин С.А., Маклашова И.В., Богданова Ю.А.</i> Термодинамический расчет ударной адиабаты жидкого водорода до высоких давлений и температур	17
<i>Норман Г.Э., Сайтов И.М.</i> Уравнение состояния и структура проводящего твердого водорода при высоких давлениях	17
<i>Сартан Р.А.</i> Структурные свойства разогретого плотного водорода	18
Секция 7. «Квантовое моделирование»	
<i>Захарова А.В., Семенов С.Г., Бедрина М. Е.</i> Электронные состояния боразамещенных эндоэдральных ме-таллофуллеренов с иттербием и гадолинием	19
<i>Ломачук Ю. В., Мальцев Д. А., Шахова В. М., Мосягин Н. С., Титов А. В.</i> Построение потенциала встраивания в кристалл для фторидов иттербия YbF ₂ и YbF ₃ , ксенотима YPO ₄ и ферсмита CaNb ₂ O ₆	19
<i>Просняк С.Д., Скрипников Л.В., Майсон Д.Е.</i> От расчётов электронной структуры к свойствам ядер	19
<i>Решетняк В. В., Аборкин А.В.</i> Взаимодействие между атомами алюминия и углерода на границах раздела фаз алюминий-графит и алюминий-графен	20
<i>Титов А.В.</i> Эксперименты по поиску сверхтяжелых элементов из «острова стабильности», квантовая хи-мия и Периодическая таблица химических элементов.	20
<i>Флягина И.С.</i> Квантово-химическое моделирование адсорбционного понижения прочности силоксановых связей в силикатах	21
Секция 8. «Квантовые вычисления»	

<u>Ланжин А.В.</u> Применение квантовых вычислений для описания сильнокоррелированных систем электронов.	22
--	----

Секция 9. «Предзащиты диссертаций»

<u>Григорьев Ф.В.</u> Атомистическое моделирование процесса переноса тонких пленок, их структуры и свойств (по материалам докторской диссертации)	23
--	----

<u>Кондратьев Н.Д.</u> Атомистическое моделирование транспортных коэффициентов жидких углеводородов (по материалам кандидатской диссертации)	24
---	----

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ	25
ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ	25

Взгляд в будущее науки и технологии

Ланкин А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

Alex198508@yandex.ru

Мы уверены, что живём в период необычайно быстрого научно-технического прогресса, и в том, что в будущем эта тенденция сохранится и ещё более усилится. Но так ли это на самом деле? В 2005 г. вышла статья Дж. Хубнера [1], где была проанализирована частота инноваций между 1455 и 2005 годами. И результат, который там был получен, оказался весьма необычен. В работе вырисовывается колоколообразная кривая с максимумом около 1900 года. Т.е. максимальная скорость научного и технического прогресса приходится на конец 19-го – начало 20-го века, а уже в течение века двадцатого, несмотря на огромные достижения, которые в течение него были достигнуты, темпы инноваций непрерывно замедлялись. Более того, если экстраполировать полученную там кривую в будущее, то окажется, что уже к середине этого века темпы инноваций упадут до уровня тёмных веков.

Как это можно объяснить? С чем может быть связано замедление НТР уже в 20-м веке по сравнению с концом 19-го несмотря на то, что последние полвека вложения в науку в мире были, пожалуй, наибольшими за всю историю человечества? Одним из возможных ответов на этот вопрос может быть то, что современная наука в своём развитии подошла к некоторому пределу, за которым дальнейшее углубление наших представлений о свойствах вещества на фундаментальном уровне становится невозможным. Возможно, наша теория уже сейчас является достаточно хорошей, чтобы описать все аспекты свойств вещества, не только сколько-нибудь представляющие интерес для техники, но и вообще воспроизводимые в лаборатории на Земле, а, возможно, и вообще в нашей Метагалактике, по крайней мере, в современную космологическую эпоху. В то же время пространство возможного, очерчиваемое этой теорией, хотя и велико, но не безгранично, и все основные возможности для прикладной науки и технологии, которые она предоставляла, уже в значительной мере выбраны и освоены.

В 2017 году была доказана очень важная теорема [2] о том, что любая неклассическая теория, имеющая классический предел, должна содержать в себе переплетённые (entangled) состояния. Если теория, имеющая классический предел, не содержит переплетённых состояний, то она не будет отличаться от классической механики и теории поля. Очевидно, что ощущаемый нами мир на макроскопическом уровне является классическим. Также очевидным экспериментальным фактом на сегодняшний день является неклассическое поведение элементарных частиц на микроуровне. Это значит, можно сделать вывод, что как бы ни менялись представления о природе элементарных частиц в будущем, понятие переплетённых состояний в них будет сохраняться.

С другой стороны, на сегодняшний день не удалось построить ни одного варианта теории, содержащей переплетённые состояния, где нарушалось бы свойство линейности или правила Борна, и при этом не возникало бы непреодолимых противоречий или с принципом причинности, или с первым и вторым началом термодинамики. Это позволяет предположить, что копенгагенская квантовая механика является единственно возможной неклассической теорией, которая может претендовать на описание нашей реальности.

Пространство возможного, очерчиваемое квантовой механикой и квантовой теорией поля хотя и огромно, однако отнюдь не безгранично. В том случае, если копенгагенская квантовая механика является окончательной и наиболее точной теорией, доступной для нашего познания, её рамки накладывают существенные ограничения на дальнейшие пути и перспективы развития как фундаментальной науки, так и технических приложений.

Первый вывод, который можно из этого сделать, если высказанное предложение верно, состоит в том, что множество потенциально доступного нам знания всё же конечно. И, по всей видимости, именно с его ограниченностью связана наблюдаемая в статистических рядах Хубнером тенденция к замедлению НТР в течение последних 100 лет. В той или иной мере эта проблема будет присуща любой области, где поиск ведётся давно, в нём участвует большое количество людей и вложены значительные ресурсы. Все самые простые, очевидные и, чаще всего, полезные в практическом плане закономерности там уже обычно найдены. После достижения некоторого предела, область, несмотря на значительные усилия и затраты ресурсов, практически перестаёт приносить новое знание, оказывается исчерпанной.

С другой стороны, исходя из высказанного, можно осмотреть пространство, доступное для научного поиска, и попытаться найти на нём какие-то оставшиеся участки, которые остались нетронутыми, такие, где, с одной стороны, имеются значимые проблемы, а, с другой – их по сути практически никто не изучал либо по причине, что их просто не заметили, либо по той, что до определённого момента здесь не было необходимых технических средств. И такие области пока есть.

К первому типу таких областей, т.е. тех, которые ранее практически не замечались, можно отнести проблему предельного перехода от квантовой механики к классической и учёта в квазиклассических уравнениях движения первых поправок по постоянной Планка. Несмотря на то, что копенгагенская квантовая механика, скорее всего, является окончательной теорией и едва ли будет когда-либо пересмотрена, внутри неё осталась одна проблема, которая, с одной стороны, касается предмета, легко наблюдаемого вокруг нас, происходящего повсеместно и легко воспроизводимого, а, с другой – всё ещё остающегося во многом неясным. Как квантовая реальность превращается в классический мир? Как, где и каким образом при селективных измерениях идёт селекция альтернатив? Как корректно в общем случае построить квазиклассическую теорию, включающую квантовые поправки?

Все эти вопросы все ещё не получили удовлетворительных ответов и требуют дальнейших исследований. С ними также тесно связана проблема описания мезоскопических систем в области, где, с одной стороны, уже нельзя их рассматривать как классические, а, с другой, уже невозможно пренебрегать их взаимодействием с окружающей средой и вызываемой им процессом квантовой декогеренции, т.е. описание систем, лежащих на стыке классической и квантовой механики. Огромная важность этого блока вопросов, помимо их фундаментального значения, связана с тем, что именно в этой пограничной области функционируют биологические молекулы, лежащие в основе любого живого организма.

Второй тип областей, которые на сегодняшний день остаются недостаточно хорошо исследованными и где сохраняется возможность найти какое-то новое знание – это те области, где хотя основные методы и подходы известны и описаны уже достаточно давно, однако возможность их эффективного использования в связи с развитием техники, прежде всего цифровой и вычислительной, появились лишь в самое последнее время. Если проблемы, относящиеся к сфере областей первого типа, чаще являются фундаментальными, то проблемы относящиеся к этой второй области чаще носят более прикладной характер.

Примером такой сферы знаний может стать молекулярное моделирование. Хотя основные, базовые идеи этого

подхода к изучению свойств вещества были высказаны ещё в середине 70-х годов прошлого века, однако возможности компьютерной техники достигли уровня, позволяющего их эффективно использовать для описания сколько-нибудь сложных систем лишь в 2000-х. Сегодня это бурно развивающаяся область и, по-видимому, будет оставаться такой, по крайней мере, в ближайшие несколько десятилетий.

1. J. Huebner A possible declining trend for worldwide innovation// Technological Forecasting and Social Change. 2005. V. 72. P. 980 – 986
2. J. G. Richens, J.H. Selby, S.W. Al-Safi Entanglement is Necessary for Emergent Classicality in All Physical Theories// PRL. V. 119. 2017. P. 080503

Экранированное взаимодействие заряженных макрочастиц в многокомпонентной плазме влажного воздуха

Куркин С.А. , Дербенев И.Н., Дятко Н.А., Филиппов А.В.*

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

**sergey.kurkin@phystech.edu*

В работах [1,2] развита асимптотическая теория экранирования заряда пылевой частицы в диффузионно-дрейфовом приближении на основе модели точечных стоков. Рассматривалась плазма, состоящая из двух компонент: электронной и одной ионной с положительным зарядом, в качестве источника ионизации рассматривались как внешний источник ионизации газа, так и ионизация собственными электронами плазмы. Далее асимптотическая теория развивалась для систем разной сложности и в разных приближениях и было установлено, что число постоянных экранирования равно числу решаемых уравнений баланса числа или энергии частиц плазмы. В каждом случае коэффициенты алгебраического или векового уравнения для постоянных экранирования определялись в явном виде и в случае трех и четырех уравнений имели достаточно сложный вид. В плазме смесей молекулярных газов, особенно содержащих электроотрицательные примеси или добавки, число основных ионов может быть и больше четырех, поэтому представляет интерес развитие общего метода определения постоянных экранирования для многокомпонентной плазмы.

В настоящей работе рассматривается экранирование заряда пылевой частицы в многокомпонентной плазме на основе асимптотической теории экранирования. Для определения коэффициентов векового или характеристического полинома, нули которого определяют постоянные экранирования в многокомпонентной плазме, используется метод Леверье-Фаддеева. На примере плазмы влажного воздуха, создаваемой внешним источником ионизации газа, рассмотрена процедура составления укороченной системы уравнений баланса для основных ионов плазмы и определены постоянные экранирования. Показано, что число оставленных в укороченной системе основных компонент плазмы практически не влияет на значения физически важных постоянных экранирования. Установлено, что одна из постоянных экранирования практически совпадает с дебаевской во всем исследованном диапазоне изменения скорости ионизации газа от 10 до $10^{16} \text{ см}^{-3} \text{ с}^{-1}$, а остальные определяются обратными характерными длинами, диффузионно-проходимыми электронами и ионами за характерные времена процессов прилипания электронов, электрон-ионной и ион-ионной рекомбинации и конверсии ионов. Проведенные исследования показали, что как суммарная концентрация ионов, так и постоянные экранирования слабо зависят от содержания паров воды во влажном воздухе, хотя набор основных ионов при этом меняется. Оказалось, что среди постоянных экранирования есть по крайней мере одна, значение которой меньше дебаевской постоянной. Следовательно, возмущения плазмы, например, зондом при зондовых измерениях или область нарушения квазинейтральности плазмы вблизи стенок разрядной камеры будут простираются на расстояния, большие радиуса Дебая. Это необходимо учитывать при проектировании плазменных установок, работающих с влажным воздухом, типа установок очистки атмосферы от вредных примесей или аэрозолей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10424).

1. А. В. Филиппов, А. Г. Загородний, А. Ф. Паль, А. Н. Старостин // Письма в ЖЭТФ. 2005. Т.81. С.180.
2. А. В. Филиппов, А. Г. Загородний, А. И. Момот, А. Ф. Паль, А. Н. Старостин // ЖЭТФ. 2007. Т.131. С.164.

Неоднородность структурных и динамических характеристик пылевой плазмы в газовом разряде

Николаев В.С.^{1,2}, Тимофеев А.В.^{*3,2}

¹МФТИ, ²ОИВТ РАН, ³НИУ ВШЭ, Москва,

**timofeevalvl@gmail.com*

Плазменно-пылевые кристаллы принято рассматривать как пространственно-однородные структуры с равными значениями структурных и термодинамических параметров в различных областях системы. В данной работе показано, что уже в системе частиц с упрощенной моделью взаимодействия, учитывающей экранированный кулоновский потенциал и параболическую ловушку, возникает неоднородность межчастичного расстояния, амплитуды тепловых колебаний частиц, параметра Линдемана и параметра неидеальности. Исследуется вопрос о распределении величины кинетической энергии частиц в неоднородном плазменно-пылевом монослое: показано, что из-за неоднородности структурных параметров средняя кинетическая энергия частиц в центральной части структуры может значительно отличаться от средней кинетической энергии частиц на периферии. Обнаруженные эффекты проверяются при помощи аналитических методов и численного моделирования, а также посредством сравнения с плазменно-пылевым экспериментом в тлеющем разряде постоянного тока. Полученные результаты имеют важное значение для исследования конечных систем одноименных зарядов в ловушке и изучения механизма фазовых переходов в плазменно-пылевых системах.

Доклад подготовлен в результате проведения работы в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ) и с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

Свойства кристаллов и жидкости Юкавы в условиях фазового равновесия

Решетняк В.В.*, Филиппов А.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

*viktor.reshetnyak84@gmail.com

Система материальных точек, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы, является одной из наиболее распространенных и изученных моделей пылевой подсистемы комплексной плазмы [1]. Модель рассматривает движение только одной из компонент плазмы – частиц конденсированной дисперсной фазы (КДФ), а для расчета электростатического потенциала использует теорию Дебая-Хюккеля. Потенциал межчастичного взаимодействия при этом имеет вид:

$$u(r) = \frac{u_0}{r} e^{-k_D r}$$

где r – расстояние между парой частиц, величина параметра связи u_0 определяется их зарядами, а обратная дебаевская длина $k_D = \lambda_D^{-1}$ – свойствами фоновой плазмы.

Хотя в общем случае применимость теории Дебая – Хюккеля для описания комплексной плазмы дискуссионна, модель неплохо воспроизводит результаты экспериментов в широком диапазоне параметров и оказывается полезной для интерпретации экспериментальных данных [2 – 4].

Значительное количество экспериментальных и теоретических работ посвящено изучению плавления и кристаллизации пылевой подсистемы комплексной плазмы. Тем не менее, не изученными остаются ключевые вопросы физики фазовых переходов: как изменяются параметры (энтропия, плотность) при фазовом переходе. Кроме того, даже для модельной системы, каковой является ансамбль Юкавы, положение линии плавления определено приближенно, о чем свидетельствует существенное различие результатов вычислений разных авторов (сравнение известных на тот момент результатов, выполненное в работе [5], свидетельствует о разбросе в пределах 10%).

В настоящей работе исследованы равновесные свойства ансамблей Юкавы вблизи линии плавления кристаллов с объемноцентрированной (ОЦК) и гранецентрированной кубической (ГЦК) структурой. Вычислены значения скрытой теплоты плавления кристаллов и скачка плотности при фазовом переходе. Проанализированы температурные зависимости термодинамических величин. Рассмотрены два различных сценария реализации фазового перехода: в первом предполагалось, что фазовый переход инициируется охлаждением системы частиц при неизменных параметрах потенциала взаимодействия, а во втором – изменением параметра связи u_0 при постоянной температуре. Показано, что при реализации различных сценариев кривые фазового равновесия, построенные в безразмерных переменных $(\tilde{p}, \tilde{T})$, не совпадают. Здесь $\tilde{p} = p\lambda_D^3/k_B T$ – безразмерное давление, а $\tilde{T} = k_B T/(u_0 k_D)$ – безразмерная температура.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10424)

1. Фортков В.Е., Храпак А.Г., Храпак С.А., Молотков В.И., Петров О.Ф. // УФН. 2004. Т.174. № 8. С.495
2. Konopka U., Morfill G.E., Ratke L. // Phys. Rev. Lett. 2000. V.84. P. 891.
3. Ваулина О.С., Петров О.Ф., Гавриков А.В., Фортков В.Е. // Физика плазмы. Т.33. № 4. С. 311.
4. Klumov B.A., Rubin-Zuzic M., Morfill G.E. // JETP Letters. 2006. V.84. N 10. P. 542
5. Hamaguchi S., Farouki R.T., Dubin D.H.E. // Phys. Rev.E. 2007. V. 56. N 4. P. 4671.

Электростатическое взаимодействие двух заряженных диэлектрических макрочастиц в присутствии третьей точечной макрочастицы

Родин М.М.*, Филиппов А.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

*mrodin@triniti.ru

Задача об электростатическом взаимодействии заряженных частиц конечного размера возникает в физике пылевой плазмы и электролитов, при изучении молекулярных кластеров, а также в исследовании атмосфер планет и спутников [1]. Один из подходов к моделированию таких систем заключается в рассмотрении парного взаимодействия заряженных диэлектрических сфер [2,3]. Ранее в рамках этой модели было дано объяснение экспериментально наблюдаемому эффекту притяжения одноименно заряженных макрочастиц на малых расстояниях, приводящему к их коагуляции. В данной работе предпринята попытка учесть влияние соседних частиц на произвольно выбранную в ансамбле пару макрочастиц. Для простоты геометрии к системе добавлена третья заряженная частица пренебрежимо малого размера, изучено ее влияние на переход макрочастиц в режим притяжения в зависимости от таких параметров, как заряды частиц, радиусы и диэлектрические проницаемости сфер, а также расстояния между их поверхностями и точечным зарядом. Получены данные для полной силы взаимодействия и для распределения связанных зарядов на поверхностях макрочастиц, возмущение которого ответственно за возникновение сил притяжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10424).

1. Lindgren E.B., Chan H.-K., Stace A.J., Besley E. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2016. V.18. N.8. P.5883.
2. Bichoutskaia E., Boatwright A.L., Khachatourian A., Stace A.J. // J. Chem. Phys. 2010. V.133. N.2. P.024105.
3. Муниров В.Р., Филиппов А.В. // ЖЭТФ. 2013. Т.144. Вып.5(11). С.931.

Термодинамические потенциалы дебаевской жидкости на основе интегральных уравнений жидкости

Филиппов А.В.*, Решетняк В.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

*fav@triniti.ru

В работах [1,2] было показано, что уравнение Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении очень хорошо описывает зависимости давления и свободной энергии дебаевской плазмы. Эффективный параметр неидеальности, Γ^* , определяется соотношением [3]:

$$\Gamma^* = \Gamma \left(1 + \lambda + \frac{1}{2} \lambda^2 \right) e^{-\lambda}, \quad (1)$$

где Γ – параметр неидеальности:

$$\Gamma = \frac{e^2 Z_d^2}{a_d T_d}, \quad (2)$$

λ – структурный параметр, определенный соотношением: $\lambda = k_D a_d$, e – заряд протона, z_d – заряд пылевых частиц в элементарных зарядах, a_d – среднее расстояние между частицами, связанное с их концентрацией n_d соотношением: $a_d = n_d^{-1/3}$, T_d – температура (в энергетических единицах) пылевых частиц, k_D – постоянная экранирования:

$$k_D^2 = k_e^2 + k_i^2,$$

электронная k_e и ионная k_i постоянные экранирования определены соотношениями:

$$k_e^2 = \frac{4\pi e^2 n_e}{T_e}, \quad k_i^2 = \frac{4\pi e^2 z_i^2 n_i}{T_i}. \quad (3)$$

Здесь $n_e = N_e/V$, $n_i = N_i/V$, N_e , N_i – полное число электронов и ионов в системе, соответственно, V – объем системы. Концентрации электронов, ионов и пылевых частиц связаны соотношением полной квазинейтральности:

$$z_i n_i + z_d n_d - n_e = 0.$$

В настоящей работе на основе интегрального уравнения жидкости Орнштейна-Цернике (ОЦ) для многокомпонентной жидкости [4] проведено исследование термодинамических потенциалов заряженных макрочастиц, взаимодействие которых описывается потенциалом Кулона. Показано, что в случае неидеальности только пылевой подсистемы пылевой или коллоидной плазмы уравнение ОЦ для многокомпонентной жидкости можно свести к однокомпонентному уравнению ОЦ для пылевой подсистемы с эффективным потенциалом взаимодействия, совпадающим с потенциалом Дебая или Юкавы. Подробно изучен вопрос об условии квазинейтральности плазмы в многокомпонентной системе. Вычислены внутренняя и свободная энергии, энтропия и изотермическая сжимаемость жидкости, причем последние две величины вычислялись двумя разными методами. Приведенный параметр неидеальности менялся от 0 до 155, структурный параметр – от 1 до 5. Рассмотрены случаи, когда постоянная экранирования является функцией температуры и не зависит от температуры. Показано, что значения свободной энергии в этих двух случаях оказываются одинаковыми, хотя значения внутренней энергии заметно отличаются. Сравнение данных расчетов методом интегральных уравнений жидкости с данными расчетов методом молекулярной динамики показало, что гиперцепное приближение оказывается достаточно точным для вычисления термодинамических потенциалов дебаевской жидкости, а приближение Перкуса-Иевики оказывается весьма грубым приближением.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №16-12-10424).

1. Решетняк В.В., Старостин А.Н., Филиппов А.В. // ЖЭТФ. 2018. Т.154. Вып.6(12). С. 1258-1270.
2. Решетняк В.В., Филиппов А.В. // ЖЭТФ. 2019. Т.156. Вып.1(7). С.1-12.
3. Vaulina O.S., Khrapak S. A. // ЖЭТФ. 2000. Т.117. Вып.2. С.326-328.
4. Hansen J.-P., McDonald I.R. Theory of Simple Liquids. London: Elsevier, 2006.

Переход расплава в аморфное состояние при быстром охлаждении в разных ракурсах

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

ОИВТ РАН, Москва,

*kirova@phystech.com

Показано, что резкое возрастание вязкости, изменение скорости распада корреляций, возникновение неравномерности и появление поперечного звука в тонкой плёнке расплава алюминия при быстром охлаждении происходят в одном и том же температурном интервале. Анализ проведен с помощью автокорреляционных функций сдвиговых напряжений, рассчитанных методом молекулярной динамики. Зависимости от скорости охлаждения указывают на переход метастабильного в аморфное состояние, а не на фазовый переход.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 18-19-00734.

**Особенность коллективного поведения Леннард-Джонсовской системы в окрестности точки
фазового перехода кристаллизации**

Негодин В.Д.*, Флейта Д.Ю., Писарев В.В., Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва,

*vdnegodin@gmail.com

В данной работе приведены результаты анализа коллективной динамики системы частиц, взаимодействие которых описывается потенциалом Леннард-Джонса[1]. Подробно рассмотрено поведение характеризующих парных корреляторов движения частиц [2,3] в окрестности точки перехода кристалл-жидкость [4] в обоих направлениях. Коррелятор имеет вид

$$CC(t) = \left\langle \frac{[\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)] \cdot [\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)]}{|\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)| \cdot |\mathbf{r}_k(t) - \mathbf{r}_k(0)|} \right\rangle_{R_0} = \langle \cos \varphi(t) \rangle_{R_0}, \quad (4)$$

где $\mathbf{r}_i(t)$, $\mathbf{r}_k(t)$ - радиус-векторы частиц i и k , находящиеся в момент времени $t = 0$ на расстоянии R_0 .

Продemonстрировано, что выбранные корреляторы движения проявляют особенность поведения их температурной зависимости при движении вдоль изоchoры. Обнаруженный излом температурной зависимости при переходе из стабильного в метастабильное состояние характерен как при переходе из твердой фазы в жидкую, так и в обратном направлении. Исследовано влияние различных параметров на обнаруженный эффект, таких как диагностический радиус, плотность и размер системы.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ НШ-5922.2018.8.

1. Jones J. E., // Proc. R. Soc. Lond. A. 1924. V.106. P. 463
2. Волошин В.П., Маленков Г.Г., Наберухин И.Ю. // Журн. структ. химии. 2013. Т. 54(2). С. 2397.
3. Норман Г. Э., Писарев В. В., Флейта Д. Ю. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109(10). С. 689
4. Holian B.L., Evans D.J. // J. Chem. Phys. 1983. Vol. 78. P. 5147.

**Изучение поведения Леннард-Джонсовской системы в окрестности точки кипения методом
пространственно-временных корреляционных функций**

Поляченко Ю.А.*, Флейта Д.Ю., Писарев В.В., Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва,

*polyachenko.yua@phystech.edu

Данное исследование посвящено изучению поведения коллективных смещений частиц модельной системы в широком диапазоне параметров в окрестности линии сосуществования жидкой и газообразной фаз. Взаимодействие частиц описывалось хорошо изученным[1] потенциалом Леннард-Джонса[2]. Анализ коллективной динамики проводился с помощью метода парных пространственно-временных корреляционных функций [3,4] в окрестности точки перехода жидкость-газ в обоих направлениях. Продemonстрировано наличие особенностей температурного поведения характеристических корреляторов [5] при изохорической эволюции системы. Обнаруженный эффект излома температурной зависимости корреляционного коэффициента $CC(T, \tau) = \langle \cos \varphi \rangle_{R_0}$ при переходе из стабильной в метастабильную фазу характерен как переходу из жидкости, так и обратно. Влияние плотности, размера системы и иных параметров на величину эффекта также приведено.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 18-19-00734.

1. Holian B.L., Evans D.J. // J. Chem. Phys. 1983. Vol. 78. P. 5147.
2. Jones J. E. // Proc. R. Soc. Lond. A. 1924. V.106. P. 463
3. Poole P.H., Donati C. // Physica A. 1998. Vol. 261. P. 51.
4. Волошин В.П., Маленков Г.Г., Наберухин И.Ю. // Журн. структ. химии. 2013. Т. 54(2). С. 2397.
5. Норман Г. Э., Писарев В. В., Флейта Д. Ю. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109(10). С. 689

Изучение коллективных движений в металлическом расплаве в окрестности точки кристаллизации методом пространственно-временных корреляционных функций

Флейта Д.Ю.* , Писарев В.В., Норман Г.Э.

ОИВТ РАН, Москва,

**fleyta.du@phystech.edu*

В данной работе были исследованы коллективные движения частиц в равновесном и метастабильном состояниях жидкости в окрестности точки фазового перехода жидкость-кристалл. В качестве объекта изучения были рассмотрены металлические расплавы Al, Cu, Ni и их бинарных сплавов, моделируемых методом молекулярной динамики с применением ЕАМ (embedded atom model) потенциала взаимодействия [1,2].

В качестве инструмента исследования была выбрана независимая от температуры системы четырёхточечная парная корреляционная функция [3,4]. Похожие функции рассматривались ранее в работе [5] для выявления коллективных движений атомов в равновесной системе.

С помощью корреляционного коэффициента вида

$$CC(T, \tau) = \left\langle \frac{[\mathbf{r}_i(t + \tau) - \mathbf{r}_i(t)] \cdot [\mathbf{r}_k(t + \tau) - \mathbf{r}_k(t)]}{|\mathbf{r}_i(t + \tau) - \mathbf{r}_i(t)| \cdot |\mathbf{r}_k(t + \tau) - \mathbf{r}_k(t)|} \right\rangle_{R_0, t} = \langle \cos \varphi \rangle_{R_0, t}$$

было обнаружено характерное изменение поведения жидкости при переходе в метастабильную область. Количественно это проявляется в особенности данного коррелятора в переходной области от равновесного к метастабильному состоянию при изохорическом охлаждении. Данный эффект был наиболее ярко выражен в соединениях меди при размере диагностического кластера R_0 до 7 Å. Зависимость эффекта от сорта вещества и других размерных параметров также проанализирована.

Анализ перехода системы из стабильной твердой фазы в перегретую метастабильную область также продемонстрировал нетривиальное поведение температурной зависимости данного корреляционного коэффициента. Обнаружено, что в твердом теле величина корреляций с ближайшим окружением в разы больше чем корреляции на расстоянии второй координационной сферы. Температурная зависимость коэффициента проявляет монотонный рост до определенной величины перегрева, а при дальнейшем нагреве, понижается до значений характерных жидкому состоянию. Физическая интерпретация данного поведения обсуждается.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ НШ-5922.2018.8.

1. Daw M. S., Foiles S. M., Baskes M. I. // Mat. Sci. Rep. 1993. Vol. 9. P. 251.
2. Cherne F. J., Baskes M. I., Deymier P. A. // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 65. P. 024209.
3. Poole P.H., Donati C. // Physica A. 1998. Vol. 261. P. 51.
4. Норман Г. Э., Писарев В. В., Флейта Д. Ю. // Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109(10). С. 689
5. Волошин В.П., Маленков Г.Г., Наберухин И.Ю. // Журн. структ. химии. 2013. Т. 54(2). С. 2397.

Континуальные модели явлений переноса в дискретной среде

Груздков А.А.^{*1}, Казаринов Н.А.²

¹СПбГТИ(ТУ), ²СПбГУ, Санкт-Петербург

*gruzdkov@mail.ru

Классические модели сплошных сред, в частности волновое уравнение и уравнение теплопроводности, формально основаны на рассмотрении бесконечно малого элемента среды и соответствующих предельных переходов. Однако, признавая огромное прикладное значение этих моделей, следует отметить, что сам вывод классических уравнений является не вполне корректным, что может приводить к проблемным ситуациям. С одной стороны, классические уравнения не удовлетворяют некоторым фундаментальным физическим принципам, например, волновое уравнение не обладает инвариантностью относительно преобразования Галилея, а уравнение диффузии допускает мгновенную передачу возмущений. С другой стороны, в определённых ситуациях свойства непрерывных моделей существенно отличаются от свойств дискретной среды, которую они должны описывать [1].

Устранение недостатков классических уравнений традиционно производится за счет их модификации — в уравнение теплопроводности добавляется инерционный член, в волновое уравнение вводятся диссипативные члены, используются производные дробного порядка и т.д. Такая процедура носит, однако, сугубо формальный характер и не учитывает физической природы рассматриваемых явлений, поэтому получить таким образом модели, обладающие определенной универсальностью и широкой областью применимости, по-видимому, нельзя.

Предлагается подход, основанный на точном решении задачи о передаче возмущения в дискретной цепочке. Получено решение для произвольного закона внешнего воздействия. Предельный переход позволяет выразить смещения и скорости частиц через функции Бесселя. Таким образом, можно поставить вопрос о наиболее удачном выборе операторов, которые следует использовать при моделировании сплошной среды.

1. Петров Ю.В., Груздков А.А., Казаринов Н.А. // Доклады РАН 2008. т.423. №. 1. С.51-55.

Предсказание вязкости жидких углеводородов для задач индустрии

Кондратьев Н.Д.

НИУ ВШЭ, Москва,

nkondratyuk@hse.ru

Современная промышленность проявляет большой интерес к исследованию свойств углеводородов, так как они входят в состав топливных, смазочных и изоляционных жидкостей. Одними из определяющих характеристик являются транспортные свойства: диффузия, вязкость и теплопроводность. В работе проведен анализ применимости методов молекулярной динамики и классических потенциалов взаимодействия по воспроизведению свойств жидких углеводородов. Выполнен расчет расширенного уравнения состояния для разветвленных алканов в широком диапазоне давлений (от 0.1 до 1000 МПа). В полученных точках уравнения состояния рассчитана зависимость коэффициента вязкости от давления двумя независимыми подходами: методом неравновесной молекулярной динамики и через формулу Грина-Кубо. Подобные данные повсеместно используются при создании смазочных материалов. Выполнено сравнение с экспериментальными значениями, проанализирована применимость данных методов.

Доклад подготовлен в результате проведения работы в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ) и с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации "5-100".

Изучение теплопроводности одномерных неоднородных наноструктур

Федоров А.С.^{*1}, Еремкин Е.В.², Соседкин О.А.², Высотин М.А.¹

¹ИФ СО РАН, ²СФУ, Красноярск,

*alex99@iph.krasn.ru

В настоящее время прямое преобразование тепла в электричество с помощью термоэлектрических материалов (ТМ) является одним из наиболее перспективных направлений в энергетике будущего. В последние годы был достигнут большой прогресс в улучшении их термоэлектрической добротности ZT, основного безразмерного показателя, который определяет эффективность преобразования тепло-электричество для термоэлектрических устройств. ZT определяется как $ZT = \frac{S^2 \sigma T}{k}$, где S-коэффициент Зеебека, σ -коэффициент электропроводности и k- коэффициент теплопроводности [1]. Современный прогресс в увеличении ZT в основном связывается с уменьшением теплопроводности k с помощью наноструктурирования- «фононной инженерии». В [2] было показано, что на тепловой перенос и электрический ток очень большое влияние оказывает рассеяние на границах для 1D, 2D и 3D наноструктур. В данной работе приводятся результаты теоретического исследования методом молекулярной динамики (МД) одномерных периодических наноструктур, состоящих из периодических областей, отличающихся массами. Более детально - проводилось исследование влияния границ периодических атомных слоев на значение коэффициента теплопроводности всей структуры. Подобные исследования уже выполнялись с помощью МД исследований ранее, см. [3-4]. Нами была предложена новая модификация МД расчетов для нахождения коэффициента теплопроводности, основанная на использовании в МД расчетах вместо двух термостатов одного, а также введения диссипативных сил трения, создающих градиент температуры вдоль исследуемой структуры. С помощью данной модификации МД метода и применения эмпирических потенциалов для одномерных неоднородных периодических наноструктур было установлено, что минимальной теплопроводности структуры можно добиться, чередуя слои с максимально различающимися массами. Продemonстрировано очень большое падение температуры на границе между слоями с разной массой атомов. Данный эффект объясняется непрохождением части тепловой энергии из одного слоя атомов в соседний из-за отражения коротковолновых фононов от барьера между слоями с атомами

разной массы. С помощью анализа коэффициентов (авто)корреляции показано, что на границах разных атомных слоев движение атомов более коррелировано по сравнению с другими областями. Данные расчеты могут помочь при создании наноструктурированных одномерных материалов, обладающих минимальным коэффициентом теплопроводности для их использования в различных областях современных технологий.

Работа была выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 16-13-00060-П.

Литература:

1. M. Rowe, Thermoelectrics handbook: macro to nano. CRC press. 80, 2005
2. X.W. Wang, H. Lee, Y.C. Lan, G.H. Zhu, G. Joshi, D.Z. Wang, J. Yang, A.J. Muto, M.Y. Tang, J. Klatsky, S. Song, M.S. Dresselhaus, G. Chen, Z.F. Ren, Enhanced thermoelectric figure of merit in nanostructured n -type silicon germanium bulk alloy, Appl. Phys. Lett. V.93, 2008, 193121.
3. E. S. Landry, M. I. Hussein, and A. J. H. McGaughey, Complex superlattice unit cell designs for reduced thermal conductivity, Phys. Rev. B 77, 2008, 184302
4. Patrick K. Schelling, Simon R. Phillpot and Pawel Koblinski, Comparison of atomic-level simulation methods for computing thermal conductivity, Phys. Rev. B 65, 2002, 144306

Молекулярно-динамическое моделирование облучения металлов импульсными пучками ионов

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

¹ОИЯИ, Дубна, ²СУ, София, ³МГУНТ, Улан-Батор

*zarif@jinr.ru

Теоретические и экспериментальные исследования взаимодействия мощных импульсных пучков (МИП) заряженных частиц с различными материалами проводятся достаточно давно [1-3]. При воздействии импульсных пучков ионов на мишень происходит модификация поверхности и приповерхностного слоя материала мишени, которая в зависимости от параметров пучка может улучшить физико-химические свойства мишени. В этих целях МИП применяются достаточно широко.

В работе методом молекулярной динамики проведено моделирование процессов взаимодействия импульсных пучков ионов с металлическими мишенями. Основными параметрами импульсного пучка ионов, взаимодействующего с мишенью, являются энергия ионов, длительность импульса и плотность заряда на единицу площади мишени. Используя эти параметры, можно приближенно оценить количество ионов, падающих на единицу площади поверхности в зависимости от времени (распределение ионов пучка в объеме). Это является важной информацией для проведения молекулярно-динамического моделирования.

Получены результаты молекулярно-динамического моделирования взаимодействия МИП ионов с энергией 1кэВ-100кэВ с металлическими мишенями в зависимости от распределения пучка в объеме. Эти результаты можно использовать для развития модели импульсного пучка ионов.

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

1. Бойко В.И., Евстигнеев В.В. Введение в физику взаимодействия сильноточных пучков заряженных частиц с веществом. М.: Энергоатомиздат, 1988. 137 с.
2. Диденко А.Н., Лигачев А.Е., Куракин И.Б. Воздействие пучков заряженных частиц на поверхность металлов и сплавов. М.: Энергоатомиздат, 1987. 183 с.
3. Блейхер Г.А., Кривобоков В.П. Влияние параметров мощных импульсных пучков заряженных частиц на интенсивность и энергоэффективность эрозии поверхности металлов//Известия вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. 2013;(2):48-54.

Диффузия ионов в водном растворе сополимеров этилена и этиленоксида

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

ОИВТ РАН, Москва,

*bakulin.ik@phystech.edu

С помощью методов классической молекулярной динамики рассматривается ионная проводимость системы линейных статистических сополимеров этилена и этиленоксида в водном растворе. Модель цепи статистического сополимера состоит из 100 звеньев этилена (C_2H_4) и этиленоксида (C_2H_4O). Для воспроизведения физических свойств раствора применяются различные потенциалы взаимодействия [1-5]. Коэффициенты переноса компонентов системы вычисляются с помощью соотношений Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо. Рассматривается зависимость между диффузией ионов и мольной долей этилена в полимерной цепи и массовой долей полимера в водном растворе. Работа выполнена при поддержке гранта РНФ 18-19-00734.

1. Smith G.D. et al. J. Phys. Chem. 97 (49), 12752 (1993).
2. Bedrov D. et al. J. Phys. Chem. 102 (6), 996 (1998).
3. Winger M. et al. Mol. Phys. 107 (13), 1313 (2009).
4. Dang L.X. et al. J. Am. Chem. Soc. 117 (26), 6954 (1995).
5. Smith G.D. et al. J. Phys. Chem. A 101 (9), 1705 (1997).

Термодинамические характеристики ударно-сжатого жидкого бензола в методах реакционной молекулярной динамики и равновесной термодинамики

Губин С.А., Козлова С.А.*, Маклашова И.В.

НИЯУ МИФИ, Москва,

*sandra969@yandex.ru

Молекулярно-динамическое (МД) моделирование ударно-волнового сжатия бензола в диапазоне давлений $P=1-50$ ГПа проводилось с использованием межмолекулярного реакционного силового поля ReaxFF [1] методом Гюгонистат, реализованным в программном коде LAMMPS. Сравнение результатов МД моделирования с равновесными термодинамическими расчетами выполнялось с помощью термодинамического кода TDS [2], основанного на фундаментальном методе экстремума характеристических функций (МЭХФ) [3].

Расчетные параметры: степень сжатия, давление и температура в ударной волне, зависимость волновой скорости от массовой скорости в основном согласуются с термодинамическими расчетами и экспериментальными данными. Некоторое различие температур за фронтом ударных волн с давлением $P < 30$ ГПа, рассчитанных на основе МД моделирования и термодинамического кода TDS объясняется тем, что равновесные состояния системы не достигаются из-за недостаточного времени МД расчета.

В отличие от МД моделирования равновесные термодинамические расчеты ударно-волнового сжатия жидкого бензола полностью согласуются с экспериментальными данными во всем диапазоне давлений на ударной адиабате и воспроизводят излом давления, обусловленный фазовым превращением нанографита в наноалмаз.

Термическое разложение бензола в ударной волне проходило с образованием молекулярного водорода H_2 и углеводородных молекул C_nH_m с большим содержанием атомов углерода ($n > m$). В дальнейшем эти углеродные молекулы формировали один кластер, состоящий из более тысячи атомов углерода и водорода. При этом в системе возрастала концентрация молекулярного водорода.

1. Chenoweth K., van Duin A. C. T., Goddard W. A. // J. Phys. Chem. A. 2008. V. 112. P. 1040–1053.
2. Victorov S.B., Gubin S.A., Maklashova I.V., Revyakin I.I. // in: Energetic Materials, ignition, Combustion and Detonation. 32nd int. Annual Conf. of ICT, Karlsruhe, Germany, 2001, P.69/1.
3. Губин С.А., Одинцов В.В., Пепекин В.И. Термодинамические расчеты сложных химических систем. М.: Изд. МИФИ, 1987.

Молекулярное моделирование конденсации в смеси метан-этан

Ленёв Д.Ю.^{*1}, Писарев В.В.²

¹ОИВТ РАН, ²НИУ ВШЭ, Москва,

**lenevdy@mail.ru*

Смесь метана и этана при температуре 250 К с долей метана от 0 до 0.7 исследуется методом молекулярной динамики. Используются потенциалы межатомного взаимодействия TraPPE-UA и TraPPE-EH, которые отличаются друг от друга способом учёта атомов водорода. Межмолекулярное взаимодействие описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, а связь С-С в этане моделируется гармоническим потенциалом.

Сжатием и расширением моделируемой ячейки исследуются процессы конденсации и испарения смеси. Определяются границы устойчивости жидкой и газовой фаз. Рассматривается зависимость давления смеси от времени. Смесь доводится до нужного давления, и исследуется её дальнейшая эволюция. Изменение давления свидетельствует о наличии фазового перехода в системе.

Целью работы является определение давления, при котором он начинается происходить. Проведено сравнение параметров критической точки, полученных из рассчитанных спинодалей, с другими теоретическими работами. В рамках данной работы дополнительно была рассчитана фазовая диаграмма для исследованных условий, чтобы отличить недостатки потенциала от других вносящих погрешность факторов.

Данные, полученные с помощью моделирования, могут быть использованы при разработке газовых месторождений для определения фазового состава системы. Также результаты работы помогут лучше понять механизм возникновения конденсатной пробки, которая уменьшает эффективность газодобычи.

Работа поддержана грантом РФ 17-79-20391

Молекулярно-динамический анализ топологии переплетения линейных полимеров в контакте с углеродными наночастицами

Логунов М.А.^{*}, Орехов Н.Д.

ОИВТ РАН, Москва,

**mikhail.logunov@phystech.edu*

Свойства полимерных цепей, находящихся в контакте с поверхностью наноразмерного наполнителя, неизбежно отличаются от свойств чистого полимера. Протяженные нановключения, воздействуя на подвижность молекул полимера, создают дополнительные топологические ограничения.

В рамках метода молекулярной динамики исследуется структура полимерного нанокомпозита на примере модельной системы полиэтиленовой матрицы с углеродными нановключениями: нанотрубками и графеновыми листами. С помощью методики расчета примитивного пути [1] анализируется изменение топологии переплетения полимерных цепочек в ходе одноосного деформирования как для случая чистого полиэтилена, так и для нанокомпозита. Продемонстрировано, что наличие протяженных наночастиц замедляет процесс распутывания узлов между полимерными цепочками. На основе полученных данных делается попытка связать наблюдаемые изменения в упругих свойствах и динамике образования пор [2], возникающие при добавлении наночастиц, с процессом распутывания межцепочечных узлов.

Работа поддержана грантом Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ НШ-5922.2018.8.

1. Sukurmaran S.K., Grest G.S., Kremer K., Everaers R. Identifying the primitive path mesh in entangled polymer liquids // Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics 2005 V. 43 N. 8 PP. 917 – 933
2. Logunov M. A., Orekhov N. D. Molecular dynamics study of cavitation in carbon nanotube reinforced polyethylene nanocomposite // Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2018. – Т. 946. – №. 1. – С. 012044

Атомистическое моделирование свойств пористых тонких пленок

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

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

**fedor.grigoriev@gmail.com*

Тонкие пленки, напыленные почти параллельно к подложке (glancing angle deposition, GLAD), обладают высокой пористостью и низким показателем преломления, что позволяет использовать их, в частности, в антибликовых покрытиях [1,2]. В настоящее время развитие технологий суперкомпьютерного моделирования позволяет исследовать зависимость свойств GLAD-пленок от условий напыления в рамках классических атомистических методов. Размеры кластеров могут достигать несколько десятков нанометров, что близко к технологическим толщинам одного слоя (четверть длины волны видимого света в среде) многослойного оптического покрытия.

Ранее на основе разработанного атомистического метода моделирования процесса напыления тонких пленок [3] было проведено исследование свойств GLAD-пленок от угла между направлением потока осаждаемых атомов и нормали к подложки (угол напыления, deposition angle) и других параметров [4]. В настоящей работе исследуются напыление чередующихся слоев с высокой и низкой плотностью, эффекты анизотропии, структурные и механические свойства GLAD-пленок и пленок с чередующимися слоями.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 19-11-00053.

1. Robbie K., Brett M. J., Lakhtakia A. // *Nature*. 1996. V. 384. P.616
2. Trottier-Lapointe W., Zabeida O., Schmitt T., Martinu L. // *Appl. Opt.* 2016. V. 55. P.8796.
3. Grigoriev F.V., Sulimov A. V., Kochikov I. V., Kondakova O. A., Sulimov V. B., Tikhonravov A. V. // *Int. J. of High Perf. Comp. Appl.* 29 (2015) 184–192.
4. Grigoriev F.V., Sulimov V.B., Tikhonravov A.V. // *J. of N.-Cr. Sol.* 2019. V. 512. P.98

Термодинамический расчет ударной адиабаты жидкого водорода до высоких давлений и температур

Губин С.А.*, Маклашова И.В., Богданова Ю.А.

НИЯУ МИФИ, Москва

*sagubin@mephi.ru

Проведены равновесные термодинамические расчеты ударной адиабаты водорода до 100 ГПа. В исходном состоянии водород находился в жидком состоянии с заданными значениями плотности. В результате термического распада молекулярного водорода H_2 на атомы за фронтом ударной волны образуется смесь атомарного и молекулярного водорода. При высокой температуре смесь H_2 и H ионизируется с образованием ионов H^+ и H_2^+ и электронов.

Расчеты выполнялись с применением компьютерного кода TDS [1], в котором термодинамические свойства флюидных (газообразных сверхкритических) веществ рассчитывались на основе теоретически обоснованной модели уравнения состояния (УРС) газовой (флюидной) фазы. Эта модель УРС, построенная на основе теории возмущений и заданных потенциалов межмолекулярного взаимодействия, позволяет предсказывать в полном согласии с данными Монте-Карло (МК) термодинамические параметры флюидов и флюидных смесей, включая продукты химических реакций в широком диапазоне давлений и температур. Основная идея теории возмущения заключается в выражении избыточной энергии Гельмгольца смеси в виде ряда Тейлора относительно базисного твердосферного флюида. Предполагается, что молекулы, атомы и ионы водорода взаимодействуют друг с другом в соответствии со сферически симметричными модифицированными потенциалами Букингема Exp-6. Образование ионов и электронов учитывалось заданием энергии кулоновского потенциала.

В качестве калорического УРС продуктов и реагентов использовалась база данных ИВТАНТЕРМО.

Результаты расчетов с различными значениями начальной плотности жидкого водорода удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными [2, 3] и расчетами МК. Обсуждается возможность фазового перехода плотного водорода в ударной волне.

1. Victorov S.B., Gubin S.A., Maklashova I.V., Revyakin I.I. // Energetic Materials, Ignition, Combustion and Detonation. 32nd Int. Annual Conf. of ICT. 2001. P. 69/1–69/15.
2. Loubeyre P., Brygoo S., Eggert J., Celliers P.M., Spaulding D.K., Rygg J.R., Boehly T.R. // Phys. Rev. B. Condensed Matter and Materials Physics. 2012. V. 86. P.144115.
3. Marsh S.P. LASL Shock Hugoniot Data. Berkeley.: Univ. California Press, 1980.

Уравнение состояния и структура проводящего твердого водорода при высоких давлениях

Норман Г.Э.*, Саитов И.М.

ОИВТ РАН, Москва,

*genri.norman@gmail.com

Предположение о существовании металлического водорода выдвинуто Вигнером и Хантингтоном в 1935 г. Получена оценка давления металлизации водорода при нулевой температуре в 25 ГПа. Предполагалось, что молекулы водорода распадаются, образуя объёмно-центрированную кристаллическую решетку. В дальнейшем было проведено достаточно большое количество экспериментальных и теоретических работ, продемонстрировавших возможность образования металлического водорода при давлениях не ниже 400 ГПа. Однако только в 2017 г. было обнаружено резкое увеличение коэффициента отражения водорода при давлении 495 ГПа и температуре 5.5 К, что интерпретировалось как переход твердого водорода в проводящую фазу [1].

В докладе сделан краткий обзор теоретических и экспериментальных работ, а также предложений о практических приложениях металлического водорода. Упор сделан на последние теоретические и экспериментальные исследования и оригинальные результаты авторов доклада.

Метод квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности применяется для расчета зависимости давления, электропроводности и парной корреляционной функции (ПКФ) водорода при температуре 100 К. Расчеты выполнены с использованием пакета VASP. Для описания обменно-корреляционного взаимодействия используется приближение обобщенных градиентов с параметризацией в форме функционала PBE. Расчеты проводятся в диапазоне плотностей 1.14 – 1.8 г/см³. В качестве начальной конфигурации используется моноклинная решетка группы C2/c, так как данная структура является наиболее устойчивой в области давлений выше 260 ГПа, что при рассматриваемых температурах соответствует фазе III молекулярного твердого водорода. Число протонов в элементарной ячейке 24. Расчеты проводятся для ячейки, содержащей 192 частицы в периодических граничных условиях, что позволяет добиться сходимости давления по количеству частиц.

Обнаружен структурный переход при давлении 602 ГПа, характеризующийся заметным скачком электропроводности и резким уменьшением числа молекул H_2 . При значении плотности 1.563 г/см³ происходит исчезновение пика ПКФ на расстоянии 0.74 Å, соответствующем межатомному расстоянию в молекуле водорода, что является указанием на распад молекул водорода. Образующаяся структура является орторомбической с группой симметрии C222₁. При этом резко увеличивается значение электропроводности до 85300 (Ом·см)^{–1} и возникает пик ПКФ на расстоянии 0.92 Å. Это расстояние равно межпротонному расстоянию в молекулярном ионе H_3^+ . Природа перехода сочетает ионизацию со структурными изменениями.

Обнаружен гистерезис зависимости давления от плотности при температуре 100 К при сжатии и последующем растяжении. Наблюдается перекрытие ветвей изотермы молекулярной и немоллекулярной фазы твердого водорода, соответствующее области существования метастабильных состояний. Величина данной области 275 ГПа.

При сжатии обнаружен переход молекулярного водорода с симметрией C2/c в проводящее немоллекулярное состояние с симметрией C222₁ через промежуточную проводящую молекулярную фазу с симметрией Cmca-4. При растяжении происходит переход немоллекулярной структуры C222₁ в молекулярную Cmca-4 через промежуточную немоллекулярную структуру с симметрией P2₁/c.

При расширении до плотности 1.45 г/см^3 наблюдается образование промежуточной немолекулярной фазы с моноклинной структурой с симметрией $P2_1/c$. Данная структура соответствует метастабильному немолекулярному твердому водороду при понижении давления до 350 ГПа.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда по гранту 18-19-00734.

1. Dias R., Silvera I.F. // Science 2017. V.355. P.715.

Структурные свойства разогретого плотного водорода

Сартан Р.А.

ОИВТ РАН, Москва,

r.sartan@gmail.com

При температурах порядка тысяч кельвин и давлений единиц мегабар разогретый водород претерпевает фазовый переход флюид-флюид. При этом водород с ростом давления (температуры) становится проводящим и меняет свою структуру с молекулярной на атомарную. Природа перехода до конца не ясна; в литературе для обозначения фазового перехода разогретого плотного водорода нередко используются как «*liquid-liquid*», так и «*insulator-metal*» или «*atomic-molecular transition*». Согласно большинству теоретических работ, данный переход является переходом первого рода, однако не все эксперименты подтверждают скачок плотности.

В настоящей работе разогретый плотный водород исследуется в области фазового перехода флюид-флюид методами квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности. Основное внимание уделено структурным изменениям. Разработан метод расчета концентрации и времени жизни молекул H_2 . Два атома считались связанными, если расстояние между ними меньше, чем некоторое r_{cut} , и в течении существования связи расстояние между ними было хоть раз меньше, чем некоторое $r_{threshold}$, что физически означает существование как минимум одного колебания.

При фазовом переходе диссоциация H_2 происходит плавно, в то время как время жизни молекул резко падает на несколько порядков. Диссоциации в 5% достаточно для роста проводимости на несколько порядков. Среднее межатомное расстояние в H_2 так же имеет небольшой скачок при переходе.

Работа выполнена в рамках гранта РНФ 18-19-00734.

Электронные состояния боразамещенных эндоэдральных металлофуллеренов с иттербием и гадолинием

Захарова А.В.^{1,*}, Семенов С.Г.¹, Бедрина М. Е.²

¹ НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, ² СПбГУ, Санкт-Петербург,
*zakharova.annet@gmail.com

Методом гибридного функционала электронной плотности PBE0 с применением релятивистских эффективных потенциалов атомных остовов $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$ определены равновесные структуры, ИК спектры, особенности электронного строения и дипольные моменты молекул эндоэдрального металлофуллерена $Gd@η^6-C_{60}$ и квазивырожденных изомеров $Yb@η^2-C_{60}$ (C_{2v} , синглет) и $Yb@η^6-C_{60}$ (C_{3v} , триплет).

Изучены эффекты замещения двух и трех атомов в 6-атомном карбадиоле на атомы бора и предсказано повышение прочности $η^6$ -связей при боразамещении. Валентные электроны лантаноида локализованы в области его связи с атомами бора и углерода. Заселенности 4f-оболочек атомов Yb и Gd в эндоэдральных металлофуллеренах не меняются. Эндоатом иттербия увеличивает энергию возбуждения молекулы $1,4-B_2C_{58}$ в триплетное состояние. Молекула $Gd@η^6-B_3C_{57}$ (C_{3v} , синглет) включает 3-атомный карбадиол. Направление ее дипольного момента вдоль оси симметрии от 3-атомного цикла к ядру гадолиния указывает на локализацию отрицательного заряда в гетероциклической системе фуллерена.

Построение потенциала встраивания в кристалл для фторидов иттербия YbF_2 и YbF_3 , ксенотима YPO_4 и ферсмита $CaNb_2O_6$.

Ломачук Ю. В.* , Мальцев Д. А., Шахова В. М., Мосягин Н. С., Титов А. В.

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина,
*jeral2007@gmail.com

Расчёт электронной структуры и физико-химических свойств материалов на основе соединений d - и f -элементов (переходных металлов и лантаноидов, актиноидов, соответственно) является одним из наиболее сложных разделов современной квантовой химии. Теоретическое исследование таких систем затруднено по ряду причин: во-первых, из-за необходимости учёта релятивистских эффектов на тяжёлых атомах; во-вторых, из-за сложности расчётов твердотельных структур, содержащих d - и f -элементы. Для расчёта соединений с такими атомами нами была использована вычислительная схема, основанная на использовании методов релятивистского псевдопотенциала [1] и теории функционала плотности.

Указанная схема предполагает проведение кластерных расчетов представляющих интерес кристаллов и сопоставление результатов этих расчетов с экспериментальными данными и результатами расчетов соответствующих периодических структур. В этих моделях выделяются следующие области:

1. основная область кластера – электроны атомов, входящих в эту область, включаются в расчет явным образом, кроме электронов на самых внутренних оболочках тяжелых атомов, которые моделируются введением релятивистских потенциалов остова для соответствующих атомов [1, 2];
2. слой катионов – атомы, входящие в эту область, моделируются с использованием безэлектронных релятивистских потенциалов остова и дополнительных электростатических зарядов на ядрах атомов; параметры этих потенциалов вычисляются из результатов расчетов периодической структуры кристалла;
3. слой анионов моделируется электростатическими зарядами на ядрах атомов.

Предложенный метод использовался для изучения состояния примесных ионов U и Th в ионно-ковалентном кристалле – ксенотиме YPO_4 , определения свойств ионных кристаллов фторидов иттербия YbF_2 , YbF_3 и ферсмита $CaNb_2O_6$

Расчеты проведены с использованием оборудования центра коллективного пользования ЦОД ПИК НИЦ КИ ПИЯФ. Авторы благодарны проф. К. ван Вюллину за предоставленную программу моделирования электронной структуры при помощи двухкомпонентного варианта теории функционала плотности [3].

1. Titov A. V., Mosyagin N. S. // Int. J. Quantum Chem. 1999. V. 71. N. 5. P. 359–401.
2. Mosyagin N. S., Zaitsevskii A. V., Skripnikov L. V., Titov A. V. // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. N. 4. P. 301–315.
3. van Wullen C. // Z. Phys. Chem. 2010. V. 224. P. 413–426.

От расчётов электронной структуры к свойствам ядер

Просняк С.Д.* , Скрипников Л.В., Майсон Д.Е.

НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина,
*prosnayak.sergey@yandex.ru

Методы современной спектроскопии позволяют проводить прецизионные эксперименты на атомах и молекулах. Однако, для интерпретации полученных данных, оказывается необходимым проведение высокоточных расчётов электронной структуры. Для достижения такой точности расчётов соединений тяжёлых элементов необходимо учитывать как релятивистские эффекты, так и эффекты электронной корреляции.

Одной из таких задач является определение магнитных моментов короткоживущих ядер. Для стабильных ядер магнитные моменты известны из экспериментов по ядерному магнитному резонансу, но для короткоживущих ядер такой подход неприменим. Однако, используя экспериментальные значения постоянных сверхтонкой структуры, а также результаты расчётов электронной структуры оказывается возможным определить искомый магнитный

момент. В настоящей работе нами разработан подход для проведения таких расчётов. Он использован для предсказания магнитных моментов ядер нескольких короткоживущих элементов.

Расчёт электронной структуры короткоживущих изотопов выполнен при поддержке гранта РФФИ (проект 19-72-10019). Программа для вычисления поправки на распределение намагниченности написана при поддержке гранта Президента МК-2230.2018.2

Взаимодействие между атомами алюминия и углерода на границах раздела фаз алюминий-графит и алюминий-графен

Решетняк В.В.^{1,*}, Аборкин А.В.²

¹ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, ²ВлГУ, Владимир,

*viktor.reshetnyak84@gmail.com

Исследование межфазного взаимодействия в алюмоуглеродных системах важно для приложений материаловедения, а именно для создания композиционных материалов на основе алюминия с улучшенными прочностными характеристиками. Для атомистического описания процессов деформации и разрушения в композиционных материалах необходимо знание потенциалов взаимодействия между атомами алюминия и углерода на границе раздела фаз. В настоящей работе исследования выполнялись для систем алюминий-графит и алюминий-графен, однако, мы считаем возможным обобщение результатов для углеродных частиц, локальная структура поверхности которых близка структуре графена. Речь идет об углеродных нанотрубках, а так же луковичных структурах большого диаметра ($d \gg r_{cut} \sim 1$ нм).

Известны экспериментальные [1,2] и теоретические [3,4] работы, посвященные исследованию межфазного взаимодействия в таких системах. Однако, результаты этих работ не были использованы для построения потенциалов межатомного взаимодействия. В ряде работ, посвященных атомистическому моделированию деформации и разрушения композитов на основе алюминия и углеродных нанотрубок, расчеты выполнялись с использованием потенциала Леннарда-Джонса, параметры которого определены по правилу смеси Лоренца-Бертло. Применимость такого потенциала требует тщательной проверки, что сделано не было.

В настоящей работе для описания взаимодействия Al-C выполнена параметризация потенциала Морзе, для которой использованы результаты *ab initio* расчетов. Потенциал Морзе имеет вид:

$$u(r) = D_0 \left[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right]$$

где параметры D_0 и r_0 определяют глубину и положение потенциальной ямы. За пределами радиуса обрезки $r > r_{cut}$ межатомным взаимодействием пренебрегают.

Сначала в рамках теории функционала плотности была рассчитана энергия модельной системы, состоящей из идеальной кристаллической пленки алюминия и графена. В ходе вычислений были выбраны точки на поверхности потенциальной энергии, соответствующие различным межплоскостным расстояниям между алюминием и графеном. Затем по методу наименьших квадратов были вычислены значения параметров потенциала Морзе. Полученные параметры были использованы для расчета известной из экспериментов [1,2] величины контактного угла при смачивании расплавом алюминия поверхности графита. На каждом этапе моделирования результаты вычислений сравнивались с литературными данными. При существенном несоответствии полученных результатов данным различных теоретических работ, вычисленное значение контактного угла совпадает с экспериментально измеренным в работах [1,2] в пределах 2%.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10424)

1. Oh S.-I., Lim J.-Y., Kim Y.-C., Yoon J., Kim G.-H., Lee J., Sung Y.-M., Han J.-H. // Journal of Alloys and Compounds. 2012. V.542. P.111.
2. Landry K., Kalogeropoulou S., Eustathopoulos N. // Materials Science and Engineering: A. 1998. V.254. No.1. P.99.
3. Qi Y., Hector L.G., Ooi N., Adams J.B. // Surface Science. 2005. V.581. No.2. P.155.
4. Lee W., Jang S., Kim M.J., Myoung J.-M. // Nanotechnology. 2008. V.19. No.28. P.285701.

Эксперименты по поиску сверхтяжелых элементов из «острова стабильности», квантовая химия и Периодическая таблица химических элементов.

Титов А.В.

НИИ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина,

anatoly.titov@gmail.com

2019 год объявлен международным годом Периодической таблицы химических элементов. Так мировое научное сообщество отмечает 150-летие открытия Периодического закона химических элементов Д.И. Менделеевым в 1869 году. Приятным «дополнением» к юбилею была регистрация IUPAC в 2016 г. открытия в Дубне элементов 115 (московий), 117 (теннессин) и 118 (оганесон), которые завершили заполнение 7-го периода таблицы Менделеева. Серия успешных экспериментов по синтезу изотопов сверхтяжелых элементов (СТЭ) конца седьмого периода таблицы Менделеева (заряды ядер Z от 112 до 118) в реакциях слияния уникальных, дважды магических ядер ^{48}Ca и тяжелых (до Cf включительно) ядер мишени позволила приблизиться к одной из предполагаемых вершин «острова стабильности», соответствующей дважды магическому сферическому ядру с $Z=114$ и числом нейтронов $N=184$.

Несмотря на то, что все синтезированные сверхтяжелые ядра являются существенно нейтронно-дефицитными, времена жизни некоторых изотопов СТЭ достаточны для изучения способности соответствующих атомов образовывать химические соединения. Без подобных исследований говорить о новых химических элементах в полном смысле этого термина не приходится. Атомные номера новых нуклидов могут быть установлены не только посредством анализа цепочки распадов («физическая» идентификация), но и по своим адсорбционным свойствам («химическая» идентификация). Уже выполнена «химическая» идентификация ряда СТЭ седьмого периода. Исследования химических свойств СТЭ выполнялись нами посредством моделирования их электронной структуры

с использованием модели релятивистского псевдопотенциала (РПП) и релятивистской теории функционала плотности (RDFT), а также методов *ab initio*. В рамках модели РПП явно учитывались корреляции валентных и субвалентных (внешних остоновых) электронов, а также конечный размер ядра и брейтовское взаимодействие. Такой подход дает хорошую основу для достижения оптимального соотношения точности/затраты, что очень важно с учетом особенностей поведения СТЭ, обусловленных особо выраженными релятивистскими эффектами.

Из-за исключительной роли термохроматографии на золоте в экспериментах по «химической» идентификации СТЭ с атомными номерами $Z \geq 112$, основное внимание было уделено описанию взаимодействий СТЭ – поверхность золота. Адсорбционные энергии СТЭ на поверхности золота были оценены с использованием кластерной модели. Надежность таких исследований улучшается с использованием мониторинга распределения заряда в непосредственной близости от сайта адсорбции с учетом эффектов релаксации «кластера-в-кристалле». В некоторых случаях наши результаты существенно отличаются от результатов предыдущих теоретических исследований.

Квантово-химическое моделирование адсорбционного понижения прочности силоксановых связей в силикатах

Флягина И. С.

ИФХЭ РАН, Москва

irina.fliagina@gmail.com

Хорошо известно, что механическая прочность силикатов значительно понижается при контакте с водой по сравнению с другими неактивными средами. Причиной этого является адсорбционное понижение прочности (АПП). Установлено, что АПП силикатов во влажных условиях происходит в результате автокаталитической реакции между силоксановыми связями и гидроксил-анионами, адсорбированными на поверхности силиката [1,2].

Однако, возникают вопросы о том, почему именно гидроксил-анион вызывает эффект понижения прочности во влажных условиях, и как другие компоненты водных растворов могут влиять на деформационные характеристики силикатов. Чтобы ответить на них, было проведено квантово-химическое моделирование деформации растяжения силоксановой связи в присутствии ряда адсорбатов.

Расчеты были выполнены в программах ORCA 4.0 [3] и Gaussian 09 [4] с использованием метода теории функционала плотности wB97X-D3 с ускоряющим приближением RIJCOSX и в сочетании с базисным набором def2-TZVP def2/J. АПП силоксановой связи моделировалось путем пошагового увеличения расстояния Si...Si в предельно простых модельных кластерах $\text{H}_3\text{Si-O-SiH}_3$ и $(\text{HO})_3\text{Si-O-Si}(\text{OH})_3$ в вакууме и в присутствии следующих адсорбатов: OH^- , Cl^- , H^+ , H_3O^+ и H_2O .

Расчетные энергии активации E_a и работа разрыва W_r силоксановой связи в вакууме составили прибл. 540 кДж/моль, при этом экспериментальное значение энергии активации разрыва силикатного стекла составляет около 418 кДж/моль. В присутствии паров воды экспериментальная прочность силикатного стекла понижается вплоть до 92 кДж/моль [1]. Расчетные значения энергии активации и работы разрыва силоксановой связи в присутствии адсорбированного аниона OH^- составили прибл. 113 кДж/моль, находясь в разумном согласии с приведенным выше экспериментальным значением. В имеющейся литературе теоретические оценки энергии активации гидролитического распада силоксановой связи колеблются в пределах 19-122 кДж/моль для напряженных реакционных центров и 83-162 кДж/моль для ненапряженных [5,6]. Полученная в нашей работе оценка гидролитического распада силоксановой связи, равная приблизительно 211 кДж/моль выше приведенных в литературе и может быть объяснена высокой прочностью связей О–Н в молекулах воды, составляющей около 492.2 кДж/моль [7].

Обнаружена тенденция уменьшения энергии активации разрыва силоксановой связи при переходе от кислотных (электрофильных) к основным (нуклеофильным) адсорбатам, которая позволяет сделать вывод о том, что механизм нуклеофильного замещения реакции разрыва силоксановой связи кинетически более выгоден, чем электрофильное замещение, и АПП в силикатах увеличивается с ростом нуклеофильности адсорбатов.

1. Берштейн, В. А. Механо-гидролитические процессы и прочность твердых тел. Ленинград: Наука, 1987.
2. Malkin, A. I. Regularities and mechanisms of the Reh binder's effect// Colloid Journal. 2012. V.74. N.2. P.223.
3. Neese F. The ORCA program system, version 4.0, WIREs Comput Mol Sci// Colloid Journal. 2012. V.74. 2017, e1327. doi: 10.1002/wcms.1327.
4. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., et al Gaussian 09 Revision D.01// 2009.
5. Du J., Rimsza J.M. Atomistic computer simulations of water interactions and dissolution of inorganic glasses// npj Mater Degrad. 2017. V.1. N.16.
6. Van Ginhoven R.M., Jónsson H., Park B., Corrales L.R. Cleavage and recovery of molecular water in silica// J Phys Chem B. 2005. V.109. P.10936.
7. Maksyutenko P., Rizzo T.R., Boyarkin O.V. A direct measurement of the dissociation energy of water// J Chem Phys. 2006. V.125. P.4.

Применение квантовых вычислений для описания сильнокоррелированных систем электронов.

Ланкин А.В.

ОИВТ РАН, Москва,

Alex198508@yandex.ru

Применение методов первопринципного численного моделирования позволяет значительно упростить и расширить возможности описания сильнокоррелированных систем электронов и других заряженных частиц, таких как химические молекулы, плотная вырожденная неидеальная плазма или твёрдое тело. Однако использование в этой области ставших уже традиционными методов квантовой химии, квантовой молекулярной динамики и методов Монте Карло на интегралах по траекториям с использованием высокопроизводительных цифровых суперкомпьютерных систем сталкивается с рядом объективных ограничений связанных с тем, что поиск точного решения квантово-механической задачи при использовании стандартных алгоритмов, которые представляют задачу в виде последовательности логических операций, имеют экспоненциально большую вычислительную сложность при росте размера рассматриваемой системы. Для многих систем, представляющих практический интерес, в таком виде задача не может быть решена ни на современных вычислительных системах, ни на тех, которые могут появиться в обозримом будущем. Использование квантовых вычислений позволяет решить квантовую задачу за полиномиальное время с использованием числа кубит линейно зависящего от числу частиц в изучаемой системе, а не экспоненциальное, как в существующих суперкомпьютерах. В этом состоит важнейшее, решающее преимущество квантовых вычислений.

На текущий момент построение универсального квантового компьютера сталкивается с существенными техническими препятствиями и не представляется технически трудноосуществимым. Однако реализация простых специализированных устройств, ориентированных на решение узкой задачи, может быть существенно проще. В частности, такие устройства могут использоваться для вычисления энергии основного состояния молекулярных систем. В основе этих подходов чаще всего лежит метод, основанный на построении на основании значений молекулярных интегралов одноэлектронных орбиталей системы эффективного гамильтониана со значением энергии основного состояния пропорциональной энергии основного состояния квантовой системы с последующей её оценкой с помощью квантового алгоритма оценки фазы. Могут быть использованы также смешанные методы расчёта, при которых часть функций вычисляется с помощью квантовой вычислительной системы, а часть выполняется на классическом компьютере. Эти методы обычно строятся на основе вариационной теоремы с использованием преобразования унитарных связанных кластеров. Известны также подходы, использующие адиабатические квантовые вычисления.

Это уже позволяет осуществлять квантовые расчёты по крайней мере для не очень больших молекулярных систем. Будет сделан обзор работ по моделированию молекул с помощью квантовых симуляторов.

Работа выполнена при поддержке по гранту РНФ 18-19-00734.

Атомистическое моделирование процесса переноса тонких пленок, их структуры и свойств (по материалам докторской диссертации)

Григорьев Ф.В.

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

*fedor.grigoriev@gmail.com

Положения, выносимые на защиту.

1. Разработан математический метод атомистического моделирования напыления тонких пленок на масштабах 10–100 нм, учитывающий основные технологические параметры процесса напыления и использующий технологии суперкомпьютерных вычислений.

2. Разработаны атомистические модели для расчета структурных и механических свойств тонких пленок на масштабах 10–100 нм. Проведено комплексное моделирование зависимости механических и структурных свойств диоксида кремния от параметров напыления.

2.1. Обнаружен и исследован эффект локального плавления (ЛП) – превышение локальной температуры пленки над температурой плавления диоксида кремния в месте соударения высокоэнергетического атома кремния с пленкой. Эффект ЛП оказывает влияние на релаксацию структуры поверхностных слоев растущей пленки.

2.2. Уменьшение энергии осаждаемых атомов с 10 эВ до 0.1 эВ приводит к появлению флуктуаций плотности, заметных на профилях плотности.

2.3. Плотность пленок SiO₂ при высокоэнергетическом напылении превышает плотность стеклообразного SiO₂ на 0.1 г/см³, что приводит к увеличению показателя преломления на 0.02, подтвержденное экспериментально для пленок, полученных методом реактивного ионно-лучевого распыления с ионным ассистированием.

2.4. При высокоэнергетическом напылении в пленках SiO₂ объемная концентрация пор с размером 0.2 нм и более не превышает 10-15%. При низкоэнергетическом напылении поры, способные вместить атомы и малые молекулы, занимают до нескольких процентов объема. При низкоэнергетическом напылении увеличение температуры подложки приводит к уменьшению общего объема пор. Отжиг низкоэнергетических пленок также приводит к уменьшению пористости.

2.5. Шероховатость пленок SiO₂ составляет 0.25-0.35 нм.

2.6. Концентрация напряженных структурных колец растет с уменьшением энергии осаждаемых атомов.

2.7. В пленках и стеклах SiO₂ положения пиков радиальной функции распределения, соответствующих длине связи Si–O и расстоянию между ближайшими атомами кислорода практически совпадают. Разница в плотности пленок и стеклообразного SiO₂ объясняется различием в ориентации структурных тетраэдров.

2.8. В пленках SiO₂ при всех исследованных значениях параметров напыления наблюдается напряжение сжатия (compressive stress) величиной 102 МПа, что находится в интервале экспериментальных значений. Абсолютная величина напряжений в пленке, полученной напылением атомов кремния с низкой энергией (1 эВ), меньше, чем при напылении атомов с высокой энергией (10 эВ). С увеличением температуры подложки абсолютная величина напряжений в пленке уменьшается.

2.9. Модуль Юнга и коэффициент Пуассона пленок SiO₂, полученных высокоэнергетическим напылением, выше, чем у стеклообразного SiO₂ и пленок, полученных низкоэнергетическим напылением.

2.10. Предложен метод оценки потерь механической энергии на основе расчета обратной добротности Ω . Для стеклообразного SiO₂ получена оценка $\Omega < 10^{-4}$, что находится в интервале экспериментальных значений.

3. Разработана модель влияния пост-процессинга, включая температурный отжиг и комбинированное воздействие температуры и давления, на структурные и механические свойства тонких пленок.

3.1. Концентрация точечных дефектов в пленке диоксида кремния уменьшается в результате отжига. Плотность пленки уменьшается на величину до 0.1 г/см³, что приводит к уменьшению показателя преломления пленки на величину до 0.02. Толщина напыленного слоя пленки при отжиге увеличивается.

3.2. Комбинированное воздействие температуры и давления в пленках, полученных низкоэнергетическим напылением, приводит к сглаживанию наномасштабных флуктуаций плотности, наблюдаемых на профилях плотности.

4. Проведено комплексное моделирование высокопористых пленок, полученных высокоэнергетическим напылением потоком атомов, почти параллельным поверхности подложки, glancing angle deposition (GLAD).

4.1. При напылении под углами более 70 градусов (отсчитывается от нормали к поверхности) образуются наклонные раздельные колонны толщиной 5-10 нм. С уменьшением угла осаждения толщина колонн и расстояние между ними также уменьшаются. Увеличение температуры подложки, так же как и отжиг пленок, приводит к частичному слиянию соседних колонн.

4.2. Средняя плотность GLAD пленок примерно вдвое меньше плотности пленок, осажденных при перпендикулярном к подложке направлении потока. Показатель преломления GLAD пленок оценен как 1.2-1.3, что близко к экспериментальным значениям.

4.3. В структуре пленки, полученной высокоэнергетическим напылением с чередованием больших и малых углов напыления, толщина переходной области между слоями с разными плотностями оставляет порядка 10 нм.

4.4. При чередовании знака угла напыления формируются древовидные или зигзагообразные структуры в зависимости от частоты смены знака угла.

Атомистическое моделирование транспортных коэффициентов жидких углеводородов (по материалам кандидатской диссертации)

Кондратьюк Н.Д.

МФТИ, Москва,

kondratyuk@phystech.ru

Положения, выносимые на защиту.

1. В жидкости $n\text{-C}_{30}\text{H}_{62}$ существует как минимум два механизма движения центров масс молекул. Первый механизм заключается в колебаниях центра масс молекулы в ограниченной области, обусловленных торсионными изгибами в плотном окружении других молекул. Второй механизм имеет стохастический характер, является проскальзыванием молекулы целиком сквозь окружение. Преобладание одного механизма над другим определяет диффузию.
2. Решена проблема эквивалентности методов Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо для расчета коэффициента самодиффузии на примере жидкости $n\text{-C}_{30}\text{H}_{62}$. Решение заключается в асимптотическом продолжении автокорреляционной функции скорости центров масс молекул, обусловленном гидродинамическими эффектами в жидкости. Учет аналитического вклада данной асимптотики позволяет согласовать результаты расчета диффузии, полученные обоими методами.
3. Модели межатомного взаимодействия класса 1 (OPLS-AA, L-OPLS-AA, TraPPE-UA) не позволяют согласованно рассчитать уравнение состояния и коэффициент диффузии жидкости $n\text{-C}_{30}\text{H}_{62}$. При корректном описании уравнения состояния, OPLS-AA достаточно сильно занижает коэффициент диффузии, а TraPPE-UA ускоряет. L-OPLS-AA дает точную температурную зависимость коэффициента диффузии, но промахивается в описании уравнения состояния. Модель класса 2 COMPASS почти справляется с обеими задачами, ошибаясь в коэффициенте диффузии всего на 20%.
4. Предложена методика анализа вкладов валентных и невалентных компонент тензора вязких напряжений в интеграл вязкости Грина-Кубо в случае молекулярных жидкостей. Вклад валентных взаимодействий в вязкость сопоставим с парным.
5. Предложена оптимизация метода временной декомпозиции для расчета вязкости методом Грина-Кубо. Она заключается в использовании времен затухания автокоррелятора тензора вязких напряжений в качестве параметров аппроксимационного уравнения, приближающего зависимость интеграла вязкости от времени. Времена затухания могут быть определены из парной части автокоррелятора тензора вязких напряжений, являющейся монотонной функцией.
6. Предсказана зависимость коэффициента вязкости изононана от давления в диапазоне от 0.1 МПа до 1 ГПа. Коэффициенты вязкости при давлениях до 0.6 ГПа, рассчитанные в модели COMPASS, совпадают с опубликованными позднее экспериментальными данными в пределах погрешности методов.

ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

ВлГУ — Владимирский государственный университет, Владимир,
ГНЦ РФ ТРИНИТИ — Государственный научный центр РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Троицк,
ИФ СО РАН — Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения РАН, Красноярск,
ИФХЭ РАН — Институт физической химии и электрохимии имени А. Н. Фрумкина Российской академии наук, Москва,
НИЯУ МИФИ — Национальный исследовательский ядерный университет Московский инженерно-физический институт, Москва,
МГУНТ — Монгольский государственный университет науки и технологий, Улан-Батор, Монголия,
МФТИ — Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный,
НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова — Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва,
НИУ ВШЭ — Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Москва,
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ — Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Гатчина,
ОИВТ РАН — Объединенный институт высоких температур РАН, Москва,
ОИЯИ — Объединенный институт ядерных исследований, Дубна,
СПбГУ — Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург,
СПбГТИ(ТУ) — Санкт-Петербургский технологический институт (технический университет), Санкт-Петербург,
СУ — Софийский университет, София, Болгария,
СФУ — Сибирский федеральный университет, Красноярск.

ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. Бакулин Иван Константинович, ОИВТ РАН, Москва, +7(977)5372007, bakulin.ik@phystech.edu
2. Григорьев Федор Васильевич, НИВЦ МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, +7(916)1556794, fedor.grigoriev@gmail.com
3. Груздков Алексей Андреевич, СПбГТИ(ТУ), Санкт-Петербург, +7(911)2883748, gruzdkov@mail.ru
4. Губин Сергей Александрович, МИФИ, Москва, +7(916)9546110, sagubin@mephi.ru
5. Захарова Анна Вадимовна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, +7(951)6595707, zakharova.annet@gmail.com
6. Козлова Сандра Алексеевна, МИФИ, Москва, +7(926)8512040, sandra969@yandex.ru
7. Кондратюк Николай Дмитриевич, НИУ ВШЭ, Москва, +7(919)7711778, kondratyuk@phystech.edu
8. Куркин Сергей Анатольевич, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, +7(966)3140661, sergey.kurkin@phystech.edu
9. Ланкин Александр Валерьевич, ОИВТ РАН, Москва, +7(903)5768208, Alex198508@yandex.ru
10. Ленёв Дмитрий Юрьевич, ОИВТ РАН, Москва, +7(985)1753037, lenevdy@mail.ru
11. Логунов Михаил Александрович, ОИВТ РАН, Москва, +7(915)0154163, feodora79@gmail.com
12. Ломачук Юрий Вячеславович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, +7(921)1845015, jeral2007@gmail.com
13. Маякова Елена Викторовна, ОИВТ РАН, Москва, +7(916)5118795, mayakovae@mail.ru
14. Негодин Владислав Дмитриевич, ОИВТ РАН, Москва, +7(977)3912040, vdnegodin@gmail.com
15. Норман Генри Эдгарович, ОИВТ РАН, Москва, +7(925)0420997, genri.norman@gmail.com
16. Поляченко Юрий Анатольевич, ОИВТ РАН, Москва, +7(903)5313425, polyachenko.yua@phystech.edu
17. Просняк Сергей Дмитриевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, +7(960)2441201, prosnyak.sergey@yandex.ru
18. Решетняк Виктор Витальевич, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, +7(925)1510071, viktor.reshetnyak84@gmail.com
19. Родин Михаил Максимович, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, +7(915)2465439, mikhail.rodin@phystech.edu
20. Сартан Роман Александрович, ОИВТ РАН, Москва, +7(919)1084869, r.sartan@gmail.com
21. Тимофеев Алексей Владимирович, ОИВТ РАН, Москва, +7(495)4859263, timofeevalvl@gmail.com
22. Титов Анатолий Владимирович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, +7(964)3638324, anatoly.titov@gmail.com
23. Федоров Александр Семенович, ИФ СО РАН, Красноярск, +7(904)8985175, alex99@iph.krasn.ru
24. Филиппов Анатолий Васильевич, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, +7(910)4698239, fav@triniti.ru
25. Флейта Дмитрий Юрьевич, ОИВТ РАН, Москва, +7(985)6893269, momysf@gmail.com
26. Флягина Ирина Сергеевна, ИФХ РАН, Москва, +7(916)4339496, irina.fliagina@gmail.com
27. Шарипов Зариф Алимжонович, ОИЯИ, Дубна, +7(926)7845790, zarif@jinr.ru