

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  
17-го РОССИЙСКОГО СИМПОЗИУМА

«*ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО  
МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ*»

«*Foundations of Atomistic Multiscale Modeling and Simulation*»

#### ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Петров О.Ф., сопредседатель, 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  
Кондратюк Н.Д., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва  
Орехов М.А., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ/МФТИ, Москва  
Писарев В.В., учёный секретарь, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН, 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., НГАСУ, Новосибирск  
Титов А.В., НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ/СПбГУ, Санкт-Петербург  
Фёдоров А.С., ИФ СО РАН/СФУ, Красноярск  
Филипов 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://ihed.ras.ru/afon21>

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

Благодарим Н. Д. Кондратюка, Г. С. Смирнова и Д. Ю. Флейту за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

В сборнике представлены тезисы докладов 17-го Российского симпозиума «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 15-26 августа 2021 г.). Симпозиумы 2015-2021 гг. являются продолжением серии симпозиумов по проблемам физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах, проводившихся в 2003-2013 годы.

Как и в 2015-2019 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) Классическая молекулярная динамика,
- 2) Квантовое атомистическое моделирование,
- 3) Методы Монте Карло в статистической термодинамике и физической кинетике,
- 4) Технологии суперкомпьютерного моделирования,
- 5) Многомасштабные подходы, основанные на атомистическом моделировании,
- 6) Наука о квантовой информации / Новости квантовой механики

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>Амелюшкин И.А., Кудров М.А., Стасенко А.Л.</i> Математические модели и методы расчета взаимодействия метастабильных капель с рельефным телом в потоке воздуха . . . . .	4
<i>Белкин А.А., Рудяк В.Я., Краснолуцкий С.Л., Рафальская Т.А.</i> Молекулярно-динамическое моделирование диффузии углеродных нанотрубок в жидкости . . . . .	4
<i>Глушак А.А., Калинин А.Г., Тарарушкин Е.В.</i> Атомистическое компьютерное моделирование гидрокалумита как адсорбента для радиоактивных анионов из водных растворов . . . . .	5
<i>Кудинов А.В., Губин С.А., Богданова Ю.А.</i> Молекулярно динамическое моделирование образования нанотрубок при термическом разложении метана в условиях постоянных плотности и температуры . . . . .	5
<i>Григорьев С.Ю., Жаховский В.В.</i> Фрагментация жидкометаллической капли при облучении поляризованным ультракоротким лазерным импульсом . . . . .	6
<i>Григорьев Ф.В., Сулимов В. Б., Тихонравов А.В.</i> Анизотропия тонких пористых пленок: результаты суперкомпьютерного моделирования . . . . .	6
<i>Дмитриев С.В., Корзникова Е.А.</i> Влияние дискретных бризеров на теплопроводность и теплоемкость модельных кристаллов . . . . .	6
<i>Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</i> Массоперенос в кристаллах точечными дефектами . . . . .	7
<i>Краснолуцкий С.Л., Белкин А.А., Рудяк В.Я.</i> Молекулярно-динамическое моделирование вязкости и теплопроводности флюида в наноканале . . . . .	7
<i>Ланкин А.В., Бакулин И.К., Савилов Т.М., Дещеня В.И.</i> Молекулярно-динамическое исследование перспективных материалов электрохимических накопителей энергии . . . . .	8
<i>Магницкая М.В., Щелкачев Н.М., Камаева Л.В., Цвященко А.В.</i> Эволюционный поиск стабильных фаз в германидах переходных металлов . . . . .	8
<i>Мирзоев А.А., Мирзиев Д.А.</i> Компьютерное моделирование влияния напряжений и температуры на диффузионное упорядочение углерода в решетке мартенсита . . . . .	9
<i>Мушачев Р.Д., Лукоянов А.В.</i> Электронная структура и магнитные свойства интерметаллических соединений на основе Fe и Mn . . . . .	10
<i>Норман Г.Э.</i> Атомистический взгляд на мир . . . . .	10
<i>Писарев В.В., Кондратюк Н.Д.</i> Исследование коэффициента вязкости в органических жидкостях в широком диапазоне давлений . . . . .	11
<i>Рудяк В.Я., Лезнев Е.В.</i> Метод стохастического молекулярного моделирования процессов переноса в газах и жидкостях . . . . .	12
<i>Смирнов Г.С.</i> Образование дефектов и процессы самодиффузии в ОЦК металлах при высоких температурах . . . . .	12
<i>Смирнов Г.С.</i> Фазовая диаграмма ОРС и ОРСЗ моделей воды . . . . .	12
<i>Степанов Р.С., Колобов А.В., Сайто Ю., Фонс П.</i> Теоретические и вычислительные аспекты фазовых переходов в двумерных халькогенидах . . . . .	13
<i>Тарарушкин Е.В., Писарев В.В., Калинин А.Г.</i> Исследование поведения водородных связей в эттрингите методом классической молекулярной динамики . . . . .	14
<i>Тимофеев А.В.</i> Уникальные свойства плазменно-пылевой системы . . . . .	14
<i>Федоров А.С., Высотин М.А., Еремкин Е.В.</i> Плазмоны с переносом заряда в комплексных системах из металлических наночастиц, соединенных молекулярными проводниками . . . . .	15
<i>Флейта Д.Ю.</i> Корреляционные функции высоких порядков в различных фазах . . . . .	15
<i>Черепанова Л.А., Упоров С.А., Эстемирова С.Х., Митрофанов В.Я.</i> О формировании фазы Лавеса C14 и морфологии микроструктуры трех многокомпонентных высокоэнтропийных сплавов . . . . .	16
<i>Чернов Е.Д., Лукоянов А.В.</i> Исследование электронной структуры и электронных корреляций соединения MnS . . . . .	16
<i>Щепелев И.А., Колесников И.Д., Корзникова Е.А., Дмитриев С.В.</i> Возбуждение и распространение ударных волн в фосфорене . . . . .	17
<i>Щелкачев Н.М., Рыльцев Р.Е.</i> Машинное обучение и атомистическое моделирование . . . . .	17
<b>ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ</b> . . . . .	18
<b>ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ</b> . . . . .	19

**Математические модели и методы расчета взаимодействия метастабильных капель с рельефным телом в потоке воздуха**

*Амелюшкин И.А.\* , Кудров М.А., Стасенко А.Л.*

*МФТИ, Долгопрудный,*

*\*Amelyushkin\_Ivan@mail.ru*

Управление взаимодействием аэрозолей с обтекаемым твердым телом представляет большой практический интерес: разработка противообледенительных покрытий, изменение тепломассообмена, транспорт веществ по каналам, ламинаризация и турбулизация потока, управление пограничным слоем и ряд других приложений.

В настоящей работе развит метод расчета взаимодействия переохлажденных капель с твердым телом, покрытие которого имеет рельеф и обладает различной степенью гидрофобности. Разработаны математические модели особенностей взаимодействия переохлажденных капель и несферических кристаллов льда с наноструктурированным твердым телом. В частности, получены оценки максимального расстояния между выступами периодической поверхности в зависимости от чисел Вебера и Стокса, а также критерии режимов дробления и замерзания переохлажденных капель. Разработаны модели движения капель по наноструктурированному твердому телу, получено оригинальное выражение для тормозящей силы, которая обусловлена вращением жидкости внутри капли при ее движении по поверхности. Методом молекулярной динамики проведены параметрические исследования. Получены интерполяционные модели и оценки безразмерных критериев возникновения различных режимов взаимодействия аэрозольного потока, содержащего метастабильные переохлажденные капли, с рельефным телом в широкой области размеров расчетной области и значений основных управляющих параметров.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 19-29-13016).

1. Amelyushkin I.A., Stasenko A.L. // CEAS Aeronautics J.. 2018. V.9. N.4. P. 711-720.
2. Amelyushkin I.A., Kudrov M.A., Morozov A.L., Shcheglov A.S., Stasenko A.L. Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS, 2020. V.1, N. 2. P. 15-21.

**Молекулярно-динамическое моделирование диффузии углеродных нанотрубок в жидкости**

*Белкин А.А.<sup>1</sup>, Рудяк В.Я.<sup>2</sup>, Краснолуцкий С.Л.<sup>1</sup>, Рафальская Т.А.<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>НГАСУ, Новосибирск, <sup>2</sup>ИТ СО РАН, Новосибирск-90,*

*\*a.belkin@sibstrin.ru*

Углеродные нанотрубки (УНТ), представляющие собой свернутый фрагмент листа графена, обладают уникальными свойствами [1]. В частности, они сочетают высокую прочность и упругость, могут быть проводящими или иметь полупроводниковые свойства. Эти свойства делают УНТ востребованными при создании новых материалов, фильтров, конденсаторов, аккумуляторов, сенсоров разного типа и т.д. (см., например, [2]).

Важно отметить, что продольный и поперечный размеры УНТ могут отличаться в тысячи раз, что обуславливает анизотропию свойств как самих нанотрубок, так и наножидкостей на их основе. Такие наножидкости также очень перспективны с практической точки зрения [3]. Их исследования ведутся более двадцати лет, как правило изучались теплопроводность и вязкость. Тем не менее, результаты экспериментов чрезвычайно разнородны, а нередко противоречивы. Практически отсутствуют экспериментальные исследования диффузии УНТ, первые результаты появились лишь недавно [4]. Это обусловлено понятными проблемами, в частности, экспериментально не удается исследовать вращательную диффузию УНТ и анизотропию их трансляционной диффузии.

В данной работе с помощью созданных алгоритмов и программ для молекулярно-динамического моделирования наножидкостей с УНТ были определены продольные и поперечные коэффициенты трансляционной диффузии УНТ, а также коэффициенты их вращательной диффузии. Использованы несколько моделей УНТ, в частности 3D модель одностенной нанотрубки хиральности «кресло» длиной по 32 нм.

Исследованы особенности релаксации скорости центра масс УНТ и ее угловой скорости. Показано, что в обоих случаях можно выделить две стадии релаксации, первая из которых экспоненциальная, вторая – значительно более медленная. Автокорреляционная функция скорости малых УНТ имеет отрицательную область.

Коэффициенты продольной (к оси нанотрубки) и поперечной диффузии центра масс УНТ существенно различаются, первый может превышать второй в несколько раз. При этом средний коэффициент диффузии достаточно крупных УНТ неплохо аппроксимируется известными аналитическими корреляциями. В то же время коэффициент вращательной диффузии оказывается немного выше предсказываемых ими значений.

Наконец, были изучены особенности влияния УНТ на структуру несущей жидкости.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 20-19-00043).

1. Yakobson B.I., Brabec C.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M. // Nature. 1996. V.381. P.678.
2. Saxena H.G., Raj J. // Int. J. Engineering and Management Research. 2017. V.7. N.1. P.304.
3. Espinosa C., Ortiz-Trujillo I.C., Carlos-Cornelio J.A., Zapata-Hernández R.D., Hoyos-Palacio L.M. // DYNA. 2017. V.84. P.24.
4. Rudyak V.Ya., Tretiakov D.S. // Thermophysics and Aeromechanics. 2020. V.27. P.847.

## Атомистическое компьютерное моделирование гидрокалумита как адсорбента для радиоактивных анионов из водных растворов

*Глушак А.А.\* , Калинин А.Г., Тарарушкин Е.В.*

*НИУ ВШЭ, Москва,*

*\*aaglushak@edu.hse.ru*

Гидрокалумит – двойной гидроксид кальция и алюминия,  $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_6 \cdot \text{Cl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  – рассматривается в качестве эффективного адсорбента радиоактивных анионов [1]. Его слоистая структура формируется искаженным октаэдрами  $\text{Ca}(\text{OH})_6$  и  $\text{Al}(\text{OH})_6$ , а межслоевое пространство характеризуется высокоупорядоченным расположением анионов и молекул  $\text{H}_2\text{O}$  [2]. При этом кристаллическая структура гидрокалумита с анионом хлора является одной из наиболее изученных среди слоистых двойных гидроксидов (LDH) [2-4] и может быть основой для сравнения с другими системами. Система гидрокалумит-йодид, напротив, пока не получила достаточного внимания, и экспериментальное изучение таких систем только началось [1].

В работе представлены результаты компьютерного атомистического моделирования гидрокалумита с ионами хлора и иода в межслоевом пространстве как адсорбента для радионуклидов  $^{36}\text{Cl}$ ,  $^{129}\text{I}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ . Изучены как свойства самих кристаллов, так и взаимодействие водных растворов  $\text{CsCl}$  и  $\text{CsI}$  с их поверхностью.

Структурные и динамические параметры обеих систем моделировались с помощью метода классической молекулярной динамики с использованием силового поля ClayFF [5]. Проведено сравнение с различными имеющимися экспериментальными данными, включая данные рентгеновской дифракции, нейтронного рассеяния, инфракрасной и Рамановской спектроскопии, а также ранее проведенными молекулярно-динамическими расчетами [1-4]. Показано, что более сильная адсорбция анионов  $\text{Cl}^-$ , по сравнению с  $\text{I}^-$ , на поверхности гидрокалумита приводит также к частичной адсорбции катион  $\text{Cs}^+$  в следующем слое раствора на поверхности, что можно объяснить разницей в ионных радиусах анионов, которые составляют 175 пм для хлора против 198 пм для иода. В согласии с предыдущими работами [2,3], можно оценить, что диффузионная подвижность анионов  $\text{Cl}^-$  и  $\text{I}^-$  на поверхности гидрокалумита уменьшается примерно на порядок, что ещё раз подтверждает способность материала значительно задерживать миграцию радиоактивных анионов.

Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ в 2020-2021 годах. Расчеты выполнялись на высокопроизводительном вычислительном кластере ВШЭ "sHARISMa".

1. L. Nedyalkova, B. Lothenbach, G. Geng, U. Mader, J. Tits. Appl. Geochem., 2020, 116, 104559.
2. A.G. Kalinichev, R.J. Kirkpatrick, R.T. Cygan. American Mineralogist, 2000, 85, 1046-1052
3. A.G. Kalinichev, R.J. Kirkpatrick. Chem. Mater., 2002, 14, 3539-3549.
4. G. Renaudin, J.-P. Rapin, E. Elkain, M. François. Cem. Concr. Res., 2004, 34, 1845-1852.
5. R.T. Cygan, J.-J. Liang, A.G. Kalinichev. J. Phys. Chem. B, 2004, 108, 1255-1266

## Молекулярно динамическое моделирование образования наночастиц при термическом разложении метана в условиях постоянных плотности и температуры

*Кудинов А.В., Губин С.А.\* , Богданова Ю.А.*

*МИФИ, Москва,*

*\*sagubin@mephi.ru*

Методом молекулярной динамики проведено моделирование состава продуктов при термическом разложении метана с использованием межмолекулярного реакционного силового поля ReaxFFlg [1] реализованном в программном коде LAMMPS [2] при постоянных значениях температуры и плотности. Расчеты проводились для метана при плотностях 0,05 – 0,524 г/см<sup>3</sup> и температурах 2500 – 4000 К. Установлено, что механизм распада метана при высоких величинах температуры и плотности заключается в последовательном образовании и замещении легких углеводородов все более сложными многоатомными углеводородами, которые образуются, затем распадаются и образуются новые со все большими количествами атомов углерода. Количество углеродных атомов во вновь образующихся углеводородах возрастает со временем. Появляются все более тяжелые промежуточные продукты разложения  $\text{C}_n\text{H}_m$  ( $n > m$ ). Такие углеводородные молекулы содержат большее количество атомов углерода ( $n > m$ ), чем водорода. Термическое разложение метана проходило с образованием молекулярного водорода  $\text{H}_2$ . При этом большая часть молекул водорода  $> 90\%$  образуется при термическом разложении  $T = 3500$  К, а не в результате охлаждения системы. Наряду с молекулами углеводородов, образуются наночастицы, состоящие из атомов углерода в форме нитевидных и кольцевых структур. При снижении температуры системы до  $T = 1500$  К, крупные нитевидные структуры перестают распадаться и формируют устойчивые молекулы. Получены зависимости изменения состава продуктов разложения от времени, приведены результаты расчетов образующихся наночастиц при поддержании постоянных значений плотности и температуры. Показано влияние постепенного снижения температуры на размер наночастиц. Сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования с равновесными термодинамическими расчетами выполнялось с применением термодинамического кода TDS, основанного на фундаментальном методе экстремума характеристических функций (МЭХФ).

1. Liu L., Liu Y., Zybin S.V. ReaxFF-ig: Correction of the ReaxFF Reactive Force Field for London Dispersion, with Applications to the Equations of State for Energetic Materials // J. Phys. Chem. A. 2011. V. 115. P. 11016-11022.
2. Sandia National Labs [сайт]. URL: [http://lammps.sandia.gov/doc/Section\\_intro.html](http://lammps.sandia.gov/doc/Section_intro.html)

## Фрагментация жидкометаллической капли при облучении поляризованным ультракоротким лазерным импульсом

Григорьев С.Ю.\*, Жаховский В.В.

ФГУП ВНИИА, Москва,

\*grigorev@phystech.edu

Проведено экспериментальное и расчетно-теоретическое исследование фрагментации жидкометаллической капли из олова под воздействием ультракороткого линейно-поляризованного лазерного импульса. Результаты экспериментов демонстрируют, что разрушение такой капли в режиме умеренной интенсивности лазерного излучения характеризуется формированием струй, движущихся вдоль трех взаимно-перпендикулярных направлений. При этом показана связь между направлением разлета этих струй и направлением вектора электромагнитного поля: вращение вектора  $\vec{E}$  сопровождается вращением основных направлений, вдоль которых происходит разлет капли. Для интерпретации экспериментальных наблюдений проведен расчетно-теоретический анализ с использованием молекулярной динамики. Моделирование демонстрирует, что поглощение линейно-поляризованного света приводит к асимметричной импульсной нагрузке, в отличие от неполяризованного света, нагрузка от которого обладает осевой симметрией. Таким образом, расширение и разлет капли из жидкометаллического олова, вызванный образованием и ростом кавитационного пузыря в ее центральной области, происходит по трем выделенным направлениям: вдоль линии распространения лазерного импульса, параллельно и перпендикулярно вектору  $\vec{E}$  линейно-поляризованного электромагнитного поля лазерного импульса.

## Анизотропия тонких пористых пленок: результаты суперкомпьютерного моделирования

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

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

\*fedor.grigoriev@gmail.com

Предложен комбинированный метод моделирования оптической анизотропии тонких пористых пленок. Атомистический метод, основанный на классической молекулярной динамике, разработанный ранее в [1,2], используется для моделирования высокоэнергетического осаждения тонких пленок диоксида кремния. Усредненные параметры формы пор, определяющие анизотропные свойства пористых тонких пленок, рассчитываются с использованием оригинальной модели, основанной на методе Монте-Карло. Модель обладает высокой численной эффективностью и может быть применена к любым пористым атомистическим кластерам, полученным с помощью методов молекулярной динамики, Монте-Карло или баллистического подхода. Число атомов в кластере может достигать десятков и сотен миллионов атомов. Величины диагональных компонент тензора показателя преломления рассчитываются в рамках континуального приближения анизотропной эффективной среды [3].

Разработанный комбинированный метод протестирован путем сравнения численных и аналитических результатов для модельных задач. Метод применен к тонким пленкам диоксида кремния и диоксида титана [4]. Полученные результаты согласуются с экспериментальными данными.

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

1. 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.
2. Grigoriev F.V., Sulimov V. B., Tikhonravov A. V. // J. of N.-Cr. Sol. 2019. V. 512. P.98.
3. D. Schmidt, M. Schubert . //Journal of Applied Physics. – 2013. – Vol. 114, P. 83510
4. Grigoriev F.V., Sulimov V. B., Tikhonravov A. V. // Comp. Mat. Sci. – 2021 – Vol. 188, 110202

## Влияние дискретных бризеров на теплопроводность и теплоемкость модельных кристаллов

Дмитриев С.В.\*, Корзникова Е.А.

ИПСИМ РАН, Уфа,

\*dmitriev.sergey.v@gmail.com

Дискретный бризер - это пространственно локализованная колебательная мода большой амплитуды в нелинейной решетке, например, в кристалле. Представлены результаты молекулярно-динамического моделирования влияния дискретных бризеров на теплопроводность и теплоемкость нелинейных цепочек и модельных кристаллов.

Показано, что с повышением температуры нелинейной цепочки происходит переход от аномальной к нормальной теплопроводности, подчиняющейся закону Фурье [1]. Данный переход объясняется термофлуктуационным возбуждением дискретных бризеров, которые эффективно рассеивают фононы, снижая теплопроводность.

Развитие модуляционной неустойчивости делокализованной колебательной моды приводит к спонтанному зарождению хаотических дискретных бризеров, имеющих большое время жизни и, в конечном итоге, исчезающих в результате медленного излучения энергии в виде малоамплитудных фононов. Рассчитано отношение кинетической энергии к полной энергии (т.е. теплоемкости) в нелинейной цепочке в процессе данной трансформации динамических режимов. Показано, что дискретные бризеры повышают теплоемкость цепочки с мягким типом нелинейности и снижают её, в случае нелинейности жесткого типа [2].

Работа поддержана Российским научным фондом, грант No. 21-12-00229.

1. Xiong D., Saadatmand D., Dmitriev S.V. // Phys. Rev. E. 2017. V. 96. P. 042109.
2. Singh M., Morkina A.Y., Korznikova E.A., Dubinko V.I., Terentiev D.A., Xiong D., Naimark O.B., Gani V.A., Dmitriev S.V. // Journal of Nonlinear Science. 2021. V. 31. P. 12.

## Массоперенос в кристаллах точечными дефектами

Корзникова Е.А.\* , Дмитриев С.В.

ИПСИМ РАН, Уфа,

\*elena.a.korznikova@gmail.com

Представлены результаты молекулярно-динамического моделирования массопереноса в кристаллах краудионными комплексами и межузельными атомами, движущимися в вакансионных каналах. Показано, что сверхзвуковые краудионные кластеры намного эффективнее осуществляют массоперенос в кристалле по сравнению с одиночными краудионами [1,2]. Движение сверхзвуковых краудионных кластеров может сопровождаться неожиданным появлением вакансий на значительном удалении от точки возбуждения сверхзвуковых краудионных кластеров [1,2]. Межузельные атомы могут двигаться в вакансионных каналах ГЦК металлов со сверхзвуковой скоростью, преодолевая расстояние в сотни межатомных расстояний.

Полученные результаты раскрывают новые механизмы переноса массы в кристаллической решетке.

Работа поддержана Российским научным фондом, грант No. 21-12-00275.

1. Shepelev I.A., Bachurin D.V., Korznikova E.A., Bayazitov A.M., Dmitriev S.V. // Chinese Journal of Physics 2021. V. 70. P. 355–362.
2. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Kudreyko A.A., Velarde M.G., Korznikova E.A. // Chaos, Solitons and Fractals 2020. V.140. P. 110217.

## Молекулярно-динамическое моделирование вязкости и теплопроводности флюида в наноканале

Краснолуцкий С.Л.\*<sup>1</sup>, Белкин А.А.<sup>1</sup>, Рудяк В.Я.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НГАСУ, Новосибирск, <sup>2</sup>ИТ СО РАН, Новосибирск-90,

\*sergius-1@mail.ru

Исследование микро- и нанотечений жидкостей и газов является на сегодня одним из наиболее востребованных направлений физики и механики жидкости и газа. Это связано в первую очередь с их ключевой ролью во многих микроэлектромеханических системах (МЭМС) и нанотехнологиях, в частности, для решения задачи охлаждения непрерывно уменьшающихся в размерах электронных устройств. Для адекватного описания течений флюида в стеснённых условиях необходимо знать коэффициенты переноса. В связи с этим, ранее из первых принципов была построена статистическая теория процессов переноса в стеснённых условиях, в которой на основе флуктуационно-диссипационных теорем были получены соотношения для коэффициентов переноса [1]. На основе полученных формул проведено молекулярно-динамическое моделирование коэффициентов вязкости и теплопроводности флюида в наноканале.

Для моделирования коэффициента вязкости флюида использовался плоский канал со стенками, состоящими из атомов с параметрами потенциала Леннард-Джонса, соответствующими аргону и углероду. В качестве флюида использовались аргон и бензол. Показано, что вязкость флюида существенно зависит от высоты канала. Также вязкость флюида зависит от материала стенок и растёт с увеличением глубины ямы потенциала взаимодействия атомов стенки  $\varepsilon_b$ , но при этом не зависит от эффективного диаметра отталкивания  $\sigma_b$ . Увеличение вязкости флюида связано с усилением его структурирования при увеличении  $\varepsilon_b$ .

Также проведено моделирование теплопроводности аргона в цилиндрических наноканалах различного диаметра со стенками из различных материалов. Показано, что теплопроводность простых жидкостей в стеснённых условиях всегда ниже теплопроводности в бесконечном объёме. Она незначительно увеличивается с увеличением глубины ямы потенциала взаимодействия атомов флюида и стенок. В частности, для наноканала диаметра 8.83 нм она составила от 92% до 95% от значения в бесконечном объёме при увеличении глубины ямы потенциала взаимодействия атомов стенок  $\varepsilon_b$  от 27.70 К, соответствующей графиту, до 7910 К, соответствующей платине при фиксированном значении радиуса отталкивания потенциала  $\sigma_b = 2.55 \text{ \AA}$ . Теплопроводность флюида в наноканале увеличивается при увеличении диаметра отталкивания потенциала взаимодействия атомов стенок наноканала  $\sigma_b$ . В частности, при увеличении  $\sigma_b$  от 2.551 до 3.416  $\text{ \AA}$ , соответствующего графиту, при фиксированном значении глубины ямы потенциала  $\varepsilon_b = 857 \text{ К}$  теплопроводность аргона в наноканале диаметра 8.83 нм увеличивается на 5.6%. Кроме того, теплопроводность флюида уменьшается с уменьшением диаметра наноканала. В частности, для наноканала диаметра 17.74 нм со значениями параметров потенциала взаимодействия атомов стенок  $\sigma_b = 2.55 \text{ \AA}$ ,  $\varepsilon_b = 27.70 \text{ К}$  она составила 95.5%, а для наноканала диаметра 3.969 нм со стенками из того же материала – 83.5% от значения в бесконечном объёме. Автокорреляционная функция флуктуаций потока тепла в наноканале отличается меньшим значением в начальный момент времени и временем релаксации по сравнению с таковой в объёме. Предполагается, что одной из причин уменьшения теплопроводности в стеснённых условиях является геометрическое уменьшение размера флуктуаций потока тепла, которое приводит к снижению их среднеквадратичного значения. С другой стороны, взаимодействие флуктуаций потока тепла со стенками наноканала разрушает их, уменьшая их время жизни, и, соответственно, время релаксации потока тепла.

Работа выполнена при частичной поддержке Мегагранта Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-575) и РФФИ (грант № 19-01-00399).

1. Rudyak V., Belkin A. // Nanosystems: physics, chemistry, mathematics, 2015. V.6. N.3. P. 366.

## Молекулярно-динамическое исследование перспективных материалов электрохимических накопителей энергии

Ланкин А.В.<sup>\*1</sup>, Бакулин И.К.<sup>1</sup>, Савилов Т.М.<sup>2</sup>, Дещеня В.И.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, Москва, <sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный,

\*alex198508@yandex.ru

Одним из важных направлений развития электроэнергетики, ставшим актуальным в последнее время, стало использование таких видов электрогенерации, как фотовольтаические и ветровые электростанции. Режимы их работы, однако, существенно отличаются от режимов работы других, более традиционных систем, обладая крайне сильной зависимостью от метеорологических условий, быстрой реакцией на их изменения и ограниченной возможностью диспетчерского регулирования их мощности, отдаваемой в сеть. Данные проблемы могут быть решены путём включения в сеть систем накопления электроэнергии сверхвысокой ёмкости. Одним из вариантов таких систем могут быть проточные Red/Ox элементы. Фундаментальной проблемой для создания таких систем является подбор материалов высоко-селективных разделительных мембран.

Важным классом материалов, являющихся твёрдыми электролитами и перспективными материалами селективных ион-проводящих мембран, являются полиэферы. Для получения количественно верных результатов при их изучении необходима верификация используемых моделей.

Проверка взаимодействия вода-полимер проводится с помощью сравнения вязкости, а также энтальпии растворения 1,4-диоксана в воде. Проверка взаимодействия полимер-ион осуществляется с помощью сравнения энергии связывания молекулы 18-краун-6 эфира с ионами щелочных металлов с экспериментальными значениями. Основным результатом является воспроизведение тренда селективности связывания краун-эфира с ионами калия, рубидия и цезия [1]. Также энергия связывания иона калия совпадает с экспериментальным значением в пределах погрешности.

Другим интересным классом органических соединений являются углеводы и полимеры на их основе. Также как и в случае полиэфиров, предварительной задачей здесь является тщательный выбор силового поля. С этой целью производится моделирование энтальпии растворения и вязкости растворов простых сахаров для оценки различных представленных в литературе силовых полей и выбора тех, которые будут использоваться для предсказания свойств полимеров и соединений, представляющих непосредственный интерес для проточных Red/Ox элементов.

Помимо проточных Red/Ox элементов, перспективным способом накопления энергии является производство водорода. Высокотемпературный электролиз воды является одним из наиболее эффективных методов производства водорода. Возможность его осуществления и эффективность тесным образом связана с наличием ион-проводящих керамик. Чаще всего такие керамики изготавливаются на основе кубического диоксида циркония.

Известно, что электропроводность диоксида циркония крайне сильно зависит от наличия и концентрации кислородных вакансий в его кристаллической решётке, а также от характера их взаимодействия с атомами примеси. Это позволяет влиять на ион-проводящие свойства керамик на основе диоксида циркония путём введения в них легирующих примесей двух- и трёхвалентных металлов, таких как атомы щелочноземельных и редкоземельных элементов. Помимо этого, большое значение в переносе ионов в таких системах могут иметь дефекты кристаллической решётки, связанные с межзеренными границами в поликристаллической структуре керамики.

В рамках изучения этой проблемы сейчас осуществляется моделирование высокотемпературного монокристалла диоксида циркония. Получено, что учёт поляризации в системе существенно влияет на коэффициент диффузии ионов кислорода. В системе с поляризацией результаты существенно лучше аппроксимируют экспериментальные данные [2]. Следующий шаг в моделирование данных систем включает переход от моделирования монокристалла к моделированию поликристаллических структур.

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

1. I.K. Bakulin, N.D. Kondratyuk, A.V. Lankin, G.E. Norman // Journal of Physics: Conference Series. 2021 V. 1787 P. 012010
2. T.M. Savilov, A.V. Lankin, G.E. Norman // Journal of Physics: Conference Series. 2021 V. 1787 P. 012011

## Эволюционный поиск стабильных фаз в германидах переходных металлов

Магницкая М.В.<sup>\*1</sup>, Щелкачев Н.М.<sup>1</sup>, Камаева Л.В.<sup>2</sup>, Цвященко А.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ИФВД РАН, Троицк, <sup>2</sup>ФТИ УрО РАН, Ижевск,

\*magnma@yandex.ru

Прогнозирование новых кристаллических фаз, не встречающихся в природе, с акцентом на взаимосвязь между их составом, строением и свойствами, предоставляет теоретическую основу для создания технологически важных материалов. Примерами таких систем являются моногерманиды переходных металлов (ПМ) с нецентросимметричной кристаллической структурой типа B20, обладающие нетривиальными магнитными, топологическими и транспортными характеристиками при нормальных условиях. Это делает их перспективными для разработки новых термоэлектриков и материалов для спинтроники, работающих при комнатных температурах. В последние годы с помощью синтеза при высоких давлениях  $P$  и температурах  $T$  были впервые получены неизвестные ранее германиды ПМ, причем многие из них в течение длительного времени остаются метастабильными в условиях окружающей среды (как алмаз), сохраняя присущую им структуру B20 и сложное магнитное упорядочение.

Полиморфизм в сплавах дает хорошую возможность протестировать различные вычислительные подходы. На практике иногда сложно судить, какая из конкурирующих структур для конкретного соединения наиболее устойчива: это зависит от условий сплавообразования, таких как давление, температура, скорость охлаждения, присутствие катализаторов и т. д. В таких ситуациях возрастает роль первопринципных методов компьютерного моделирования, не зависящих от каких-либо предварительных экспериментальных данных.

В докладе представлены исследования стабильности и структурных превращений в фазах типа B20 MnGe, FeGe и RhGe в широкой области ( $P$ ,  $T$ ) фазового пространства. Первопринципные компьютерные расчеты проводились методом псевдопотенциала на основе теории функционала плотности (DFT). С помощью генетического алгоритма (имитирующего основные черты биологической эволюции) выполнен эволюционный поиск наиболее энергетически выгодных полиморфных модификаций при атмосферном и высоком давлении (при  $T = 0$ ). Затем

в квазигармоническом приближении (QHA) определены области стабильности полученных структур на (P, T) фазовой диаграмме. Для двух 3d-германидов MnGe и FeGe в магнитном состоянии получен одинаковый набор предпочтительных полиморфных модификаций. В случае FeGe этот результат согласуется с имеющейся информацией, тогда как для MnGe нами обнаружены новые гипотетические фазы в дополнение к единственной известной метастабильной фазе B20. Более того, в немагнитном состоянии MnGe наиболее выгодной оказалась тетрагональная структура, весьма необычная для этого класса соединений. Для 4d-германида RhGe получена качественно отличающаяся последовательность структур.

Эти результаты побудили нас синтезировать под давлением образцы трех германидов со структурой B20 и исследовать их с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). По особенностям на ДСК-термограммах были определены температуры фазовых превращений. Термограммы FeGe и MnGe качественно схожи по виду, тогда как RhGe отличается от двух 3d-германидов не только по найденному в расчетах набору структур, но и по форме ДСК-кривой. Во всех трех случаях на начальном участке кривой нагрева имеется слабое экзотермическое плечо, отвечающее конгруэнтному переходу из фазы B20 в другую эквивалентную фазу, что согласуется с нашими расчетами. В случае FeGe и RhGe эти результаты подтверждают известные данные. Для MnGe найденные в наших расчетах и экспериментах фазовые переходы пока не наблюдались на практике. Предположительно, это связано с «медленной» кинетикой данных переходов или с экспериментальными трудностями в реализации условий для образования и обнаружения новых фаз помимо B20-MnGe.

Работа поддержана грантами РНФ № 18-12-00438 и № 17-12-01050.

### Компьютерное моделирование влияния напряжений и температуры на диффузионное упорядочение углерода в решетке мартенсита

*Мирзоев А.А.\* , Мирзаев Д.А.*

*ЮУрГУ, Челябинск,*

*\*mirzoevaa@susu.ru*

Усовершенствование современных сталей невозможно без понимания процессов, происходящих на атомистическом уровне при различных стадиях термообработки.

В данной работе методом молекулярной динамики с использованием межчастичных потенциалов на основе модели погруженного атома (ЕАМ) проводилось моделирование перехода порядок-беспорядок в мартенситной фазе системы железо-углерод с учетом эффектов приложенного внешнего напряжения. Экспериментальные исследования, впервые выполненные Г.В. Курдюмовым [1], показали, что мартенситный переход связан с коллективной сдвиговой перестройкой кристаллической решетки. В результате мартенситного превращения образуется тетрагональная структура, представляющая собой немного растянутую вдоль одной оси и сжатую по двум другим ОЦК-решетку железа. Тетрагональное искажения решетки мартенсита было объяснено К. Зинером с точки зрения деформационных взаимодействий углерод-углерод, при котором атом углерода индуцирует поле деформации тетрагональной симметрии [2]. А.Г. Хачатурян описал результирующий фазовый переход порядок – беспорядок в рамках термодинамической теории среднего поля, в рамках микроскопической теории упругости [3]. К сожалению, классическая теория Зинера–Хачатуряна не позволяет анализировать установление ближнего порядка атомов углерода внутри x-, y-, z-подрешеток. Однако, в экспериментальных исследованиях при выдержке мартенсита высокоуглеродистых сталей при повышенных температурах было обнаружено явление кластеризации атомов углерода в виде пластинчатых скоплений атомов углерода в z-подрешетке. Указанные скопления перемежаются аналогичными по форме участками, где атомы углерода практически отсутствуют [4]. Поскольку углеродное упорядочение в основном обусловлено деформационными взаимодействиями, можно ожидать, что внешние напряжения будут изменять фазовые равновесия порядок-беспорядок и в конечном итоге запускать фазовый переход феррит-мартенсит [5]. Однако, экспериментально существование упорядоченного перехода феррит – мартенсит под действием сжимающего напряжения пока не исследовано.

В работе показано, что наблюдаемая диффузия углерода по октаэдрическим междуузлиям при повышенных температурах приводит к формированию атомами С ближнего упорядочения в виде периодических плоских скоплений, разделенных между собой областями решетки, практически свободными от углерода. Определено, что области кластеризации имеют ориентацию относительно решетки железа (102), что согласуется с результатами экспериментов, где исследовались структуры, получаемые при отпуске мартенсита на стадии двухфазного распада. Результаты атомистического моделирования показывают, что при кластеризации углерода происходит увеличение отношения параметров решетки c/a как в областях кристаллической решетки, в которых происходит формирование скоплений, так и в зонах, не содержащих атомы С. Толщина кластеров оказалась равной 17 Å, а областей, не занятых углеродом – 30 Å. Уменьшение энергии системы с течением наблюдаемого процесса можно рассматривать как движущую силу реакции с величиной 453,6 Дж/моль, что находится в качественном согласии с другими работами.

1. Kurdumoff G.V. X-ray studies of the structure of quenched carbon steel // Nature. 1928. V.122. P. 475.
2. Zener C. Theory of strain interaction of solute atoms // Physical Review. 1948. V. 74, N 6. P. 639.
3. Хачатурян А.Г., Шаталов Г.А. К теории упорядочения атомов углерода в кристалле мартенсита // Физика металлов и металловедение. 1971. Т. 32, № 1.С. 5.
4. Усиков М.П., Хачатурян А.Г. Структурные превращения при низком отпуске углеродистого мартенсита // Физика металлов и металловедение. 1977. Т. 43, № 3. С. 554.
5. Чирков П. В., Мирзоев А. А., Мирзаев Д. А. Роль напряжения и температуры в Z-упорядочении атомов углерода в решетке мартенсита // Физика металлов и металловедение. 2016, Т.117, № 11, с.1181.

## Электронная структура и магнитные свойства интерметаллических соединений на основе Fe и Mn

Мухачев Р.Д.\*, Лукоянов А.В.

ИФМ УрО РАН, Екатеринбург,

\*r.d.mukhachev@outlook.com

Интерметаллические соединения переходных металлов активно исследуются теоретически и экспериментально, поскольку могут являться функциональными материалами с широким спектром физических свойств, перспективных для применений в спинтронике и микроэлектронике. Системы тройных интерметаллических соединений  $GdTMSi$  ( $TM = Ti, Mn, Fe$ ) и  $Mn_2FeAl$ , которые были исследованы в данной работе, привлекают внимание исследователей из-за возможностей изменять физико-химические свойства в зависимости от состава или кристаллической структуры. Интерметаллиды  $GdTMSi$  кристаллизуются в тетрагональной структуре, а  $Mn_2FeAl$  – в примитивной кубической структуре  $\beta$ -Mn-типа (пространственная группа  $P4_32$ ). Соединение  $GdFeSi$  характеризуется ферромагнитным упорядочением с температурой Кюри, равной 124.5 K [1], а в случае  $GdTiSi$  температура Кюри составляет 294 K [2]. Большой интерес представляет интерметаллическое соединение  $GdMnSi$ , так как в нем было обнаружено несколько магнитных переходов при температурах 50, 275 и 310-325 K [2]. В данной работе исследование электронной структуры интерметаллических соединений проводилось в рамках метода DFT+U в пакете программ Quantum Espresso. Для ионов Gd в соединениях  $GdTMSi$  значения спиновой поляризации, полученные в результате самосогласованных расчетов, соответствуют магнитному моменту 7.2  $\mu_B$ . Ионы Fe, Ti и Si в данных интерметаллидах немагнитны, в то время как магнитный момент ионов Mn составляет около 2  $\mu_B$ , что приводит к уменьшению полного магнитного момента сплавов  $GdTi_{1-x}Mn_xSi$  для больших значений x. Расчеты DFT+U для сплава  $Mn_2FeAl$  показали, что электронные корреляции в ионах Mn приводят к увеличению полного магнитного момента. В зависимости от структуры, в  $Mn_2FeAl$  могут проявляться как полуметаллические, так и металлические свойства, при этом в структуре  $\beta$ -Mn-типа реализуется частично скомпенсированное антиферромагнитное упорядочение в хорошем согласии с экспериментальными данными. Проведенный анализ результатов для  $GdTiSi$ , легированном Mn, показал существенный рост величины плотности электронных состояний на уровне Ферми, что может свидетельствовать о существенном изменении транспортных свойств интерметаллидов. Обнаруженные изменения магнитных характеристик и электронной структуры делают систему интерметаллидов  $GdTi_{1-x}Mn_xSi$  перспективной для приложений микроэлектроники.

1. A.G. Kuchin, S.P. Platonov, A.V. Lukoyanov, A.S. Volegov, V.S. Gaviko, R.D. Mukhachev, M.Yu. Yakovleva, *Intermetallics* 133, 107183 (2021).
2. G. Skorek, J. Deniszczyk, J. Szade, B. Tysza, *J. Phys.: Condens. Matter.* 13, 6397 (2001).
3. K.A. Gschneidner, V.K. Pecharsky. *Mater. Sci. Engin. A* 287, 301 (2000).

## Атомистический взгляд на мир

Норман Г.Э.

НИУ ВШЭ, Москва,

gnorman@hse.ru

В начале выпуска 1 Фейнмановских лекций по физике сделано следующее очень важное утверждение. “Если бы в результате какой-то мировой катастрофы все накопленные научные знания оказались бы уничтоженными и к грядущим поколениям живых существ перешла бы только одна фраза, то какое утверждение, составленное из наименьшего количества слов, принесло бы наибольшую информацию? Я считаю, что это – атомная гипотеза (можете называть ее не гипотезой, а фактом, но это ничего не меняет): все тела состоят из атомов – маленьких телец, которые находятся в непрерывном движении, притягиваются на небольшом расстоянии, но отталкиваются, если одно из них плотнее прижать к другому. В одной этой фразе, как вы убедитесь, содержится невероятное количество информации о мире, стоит лишь приложить к ней немного воображения и чуть соображения.” Так Ричард Фейнман определил центральную область современной науки.

Фейнман прочитал свой курс в начале 1960-х. С тех пор возникла суперкомпьютерная техника. Физики применили её и в области, о которой сказал Фейнман. Возникло направление, получившее название *molecular modeling and simulation*. Вольный перевод: Суперкомпьютерные атомистические (молекулярные) технологии (САТ). Численные методы решения уравнений Ньютона и Шредингера для систем движущихся атомов и молекул, включая живые системы, – аппарат атомистических технологий. Это универсальное «оружие», а цели любые. Решение невозможно без суперкомпьютеров. Приводятся основная идея САТ и характерные примеры работ, ведущихся в нашем коллективе. Предсказательные возможности продемонстрированы на примере вязкости углеводородов при высоких давлениях. САТ являются инструментом не только для расчётов количественных характеристик, но и для обнаружения новых эффектов.

Возможности современных суперкомпьютеров достаточно ограничены. Поэтому, а также в силу иерархии корреляционных длин и времён, атомистический подход следует дополнить многомасштабным подходом для выхода за пределы пространственных и временных масштабов, доступных атомистическому моделированию. Общая идея поясняется на примерах. Суперкомпьютерные атомистические многомасштабные технологии (САМТ) – атомистический подход, дополненный надстройкой многомасштабной иерархической лестницы, становится магистральным направлением в современной науке.

Физики проявили немало воображения и соображения, атомная гипотеза, дополненная САМТ, действительно, содержит невероятное количество информации о мире. Однако молекулярное моделирование получило широкую известность благодаря своему прикладному значению. Это слишком “слабо”, чтобы оправдать высокую оценку Фейнмана. Но основы САМТ и некоторые приложения имеют глубокое фундаментальное значение в полном соответствии с оценкой Фейнмана. Но достаточно воображения и соображения ещё не проявлено. Вопросы оказались слишком серьезными по своей глубине.

САМТ выводят на решение трёх “великих” проблем, которые, по мнению В. Л. Гинзбурга, нельзя обойти вниманием при обсуждении состояния и путей развития физики. В первой речь идёт о возрастании энтропии и необратимости. В нашем случае эта проблема неизбежно встает при анализе того, как в классической молекулярной динамике возникает необратимость и диссипация. Ответ следует искать в квантовой механике. Отсюда переходим

ко второй проблеме – интерпретации и понимания квантовой механики. Эту проблему считаем центральной. Она даёт ключ к ответу и на третий вопрос – о связи физики с биологией и, конкретно, проблеме редукционизма. Гинзбург считал, что “это – одновременно великая физическая и биологическая проблема, будет одной из центральных в науке XXI века.” Её решение начинаем со слов Фейнмана: “Самой плодотворной мыслью, сильнее всего стимулирующей прогресс в биологии, является, по-видимому, предположение о том, что всё, что делают животные, это делают атомы, что в живой природе всё результат каких-то физических и химических процессов, а сверх этого ничего нет”. Дополняем их иерархическим (многомасштабным) подходом.

Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

#### **Исследование коэффициента вязкости в органических жидкостях в широком диапазоне давлений**

*Писарев В.В.<sup>\*1</sup>, Кондратюк Н.Д.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> НИУ ВШЭ, <sup>2</sup> ОИВТ РАН, Москва,

\*vpisarev@hse.ru

В работе представлены результаты исследования коэффициента вязкости в жидкостях и жидких смесях. Рассмотрено поведение коэффициента вязкости в широком диапазоне давлений – от состояния растянутой жидкости до давлений порядка 10 кбар. Также представлены результаты исследований как веществ в свободном объеме, так и в нанопористой среде.

Рассматриваются методы для теоретического описания зависимостей коэффициента вязкости жидкости от плотности и давления. Сопоставляются различные формы межатомных потенциалов с точки зрения воспроизведения и предсказания экспериментально наблюдаемых коэффициентов переноса в атомистическом моделировании [1]. Для больших давлений особый интерес представляет сверх-экспоненциальный рост вязкости с давлением и точка перехода к такому росту [2,3]. Анализируется влияние нанопор на вязкое течение в углеводородных жидкостях.

Обсуждаются методы аппроксимации зависимости коэффициента вязкости от плотности и давления смесей на основе различных представленных в литературе корреляций и правил смешения. Показано, что при сравнительно небольших давлениях (до 4 кбар) для бинарных и тройных смесей n-алканов хорошо работают корреляции вязкости к системе твердых сфер и линейное смешение параметров корреляций [4]. Также продемонстрировано, что правила смешения Грюнберга-Ниссана для вязкости смесей применимы даже в режиме сверх-экспоненциальной зависимости вязкости от давления [2].

Доклад подготовлен в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. Kondratyuk N.D, Lenev D.Yu., Pisarev V.V. // J. Chem Phys. 2020. V. 152. P. 191104.
2. Kondratyuk N.D., Pisarev V.V., Ewen J.P. // J. Chem Phys. 2020. V. 153. P. 154502.
3. Kondratyuk N.D., Pisarev V.V. // Fluid Phase Equilib. 2021. V. 544-545. P. 113100.
4. Pisarev V.V., Kondratyuk N.D. // Fluid Phase Equilib. 2019. V. 501. P. 112273.

## Метод стохастического молекулярного моделирования процессов переноса в газах и жидкостях

*Рудяк В.Я.\*<sup>1</sup>, Лежнев Е.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>ИТ СО РАН, Новосибирск-90, <sup>2</sup>НГАСУ, Новосибирск,

\*valery.rudyak@mail.ru

Одной из главных проблем описания различных течений флюидов и их моделирования является необходимость знания коэффициентов переноса, которые являются сложными функциями состояния моделируемой среды, ее плотности, температуры, давления и т.д. Стандартным методом определения этих коэффициентов является эксперимент. При этом, однако, имеет место известное противоречие. Механизмы процессов переноса и соответствующие коэффициенты имеют молекулярную природу, тогда как экспериментально они определяются в макроскопических опытах. Для интерпретации данных используются макроскопические соотношения, при получении которых предполагалось, что коэффициенты переноса некоторые константы.

Альтернативой эксперименту и прямым методом определения коэффициентов переноса является метод прямого молекулярного их моделирования. Таким методом является метод молекулярной динамики. Он давно и успешно применяется для этой цели. Вместе с тем получение прецизионных данных с его помощью требует значительных вычислительных ресурсов. По этой причине он все еще не применим, например, для моделирования коэффициентов переноса разреженного газа. Процедуру моделирования коэффициентов переноса удалось бы существенно ускорить, если разработать метод, имитирующий динамику молекулярной системы. Тогда, используя достаточно много таких имитированных фазовых траекторий исходной молекулярной системы, можно ожидать получить удовлетворительные данные о средних ее характеристиках, какими и являются коэффициенты переноса. Цель данной работы и состоит в разработке такого имитационного метода, пригодного для моделирования процессов переноса процессов переноса в газах и жидкостях. Фазовые траектории рассматриваемых систем моделируются стохастически. С помощью развитого метода изучаются коэффициенты переноса разреженных газов и жидкостей в объеме и разреженных газов в наноканалах. В последнем случае показано, что диффузия, вязкость и теплопроводность неізотропны, а величиной вязкости и теплопроводности можно управлять, меняя материал стенок канала. Последняя часть работы посвящена моделированию коэффициентов переноса наножидкостей как с обычными частицами, так и с углеродными нанотрубками.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского научного фонда (соглашение № 20-19-00043), РФФИ (грант № 20-01-00041) и мегагранта Министерства науки о высшего образования РФ (соглашение № 075-15-2021-575).

## Образование дефектов и процессы самодиффузии в ОЦК металлах при высоких температурах

*Смирнов Г.С.*

*НИУ ВШЭ, Москва,*

*grsmirnov@gmail.com*

Согласно стандартной теоретической модели, процессы диффузии в металлах происходят за счет образования и миграции моновакансий, с дополнительным вкладом дивакансий при высоких температурах. Данная модель хорошо подтверждается большим набором экспериментальных данных, однако ряд высокотемпературных ОЦК фаз металлов (Ti, Zr, Hf, Ce, Gd, La, Pr, U, Pu, Yb) выбивается из общей картины, процессы диффузии в них считаются аномальными. Споры о механизмах диффузии в них идут с середины прошлого века, но окончательный консенсус так и не был достигнут. В последние годы наметился значительный прогресс в этой области благодаря развитию методов атомистического моделирования, которые показывают необходимость учитывать формирование межузельных атомов при высоких температурах. В докладе на примере ОЦК фаз Ti, Zr и U обсуждаются механизмы самодиффузии в аномальных металлах, данные первопринципных и молекулярно-динамических расчетов сравниваются с экспериментальными [1,2]. Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. Smirnov G.S., Stegailov V. V. Formation free energies of point defects and thermal expansion of bcc U and Mo // J. Phys. Condens. Matter. 2019. V. 31, N. 23. P. 235704.
2. Smirnov G. Non-Arrhenius diffusion in bcc titanium: Vacancy-interstitialcy model // Phys. Rev. B. 2020. Vol. 102, N. 18. P. 184110.

## Фазовая диаграмма ОРС и ОРС3 моделей воды

*Смирнов Г.С.*

*НИУ ВШЭ, Москва,*

*grsmirnov@gmail.com*

Фазовая диаграмма вещества в широком диапазоне температур и давлений является одним из важных критериев качества потенциала взаимодействия в методе классической молекулярной динамики (МД). Вот уже на протяжении десятилетий существует проблема создания универсального потенциала для воды, который мог бы одинаково качественно описывать свойства как жидкой, так и различных её твердых фаз. В последние годы были предложены модификации стандартных трех- и четырехточечных моделей воды ОРС3[1] и ОРС[2], дающие повышенную точность описания свойств жидкой фазы. При этом точность описания свойств различных льдов в оригинальных статьях не затрагивалась. В докладе будут проанализированы существующие МД-методы расчета фазовых диаграмм молекулярных систем на основе расчетов свободной энергии и возникающие при этом проблемы. Показано, что модели ОРС и ОРС3 не могут корректно описывать большую часть льдов, которые в данных моделях оказываются метастабильными. Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

1. Izadi S., Onufriev A. V. Accuracy limit of rigid 3-point water models // J. Chem. Phys. 2016. Vol. 145, № 7.
2. Izadi S., Anandakrishnan R., Onufriev A. V. Building Water Models: A Different Approach // J. Phys. Chem. Lett. 2014. Vol. 5, № 21. P. 3863–3871.

## Теоретические и вычислительные аспекты фазовых переходов в двумерных халькогенидах

Степанов Р.С.<sup>\*1</sup>, Колобов А.В.<sup>1</sup>, Сайто Ю.<sup>2</sup>, Фонс П.<sup>3</sup>

<sup>1</sup> РГПУ им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург, <sup>2</sup> AIST, Цукуба, <sup>3</sup> Keio University, Токио,

\*frid.rom.serg@gmail.com

Динамика фазовых переходов в двумерных материалах представляется интересной и перспективной задачей современного материаловедения. Первой теорией, описывающей фазовые переходы, является теория Ландау, в которой впервые было введено понятие параметра порядка [1]. Дальнейшее развитие теория получила в работах Таулеса, Костерлица и Березинского [2][3] и позволила объяснить возможность существования сверхтекучести в тонких слоях жидкого гелия. Кроме того, данная теория применима для описания магнитных свойств двумерных материалов. В случае плавления, существует несколько моделей, по которым может происходить фазовый переход. Одна из моделей - теория Березинского-Костерлица-Таулеса-Гальперина-Нельсона-Янга [4][5], в которой утверждается, что плавление происходит путем диссоциации дислокационных пар, которые могут являться топологическими дефектами. Также плавление двумерной системы может происходить посредством одного перехода первого рода [6]. К сожалению, экспериментальных работ, в которых рассматривались бы фазовые переходы в двумерных материалах с различной структурой и природой межатомных взаимодействий, в настоящее время довольно мало. Наша работа стремится дать представление о топологических изменениях, которые приводят к фазовому переходу. На данный момент получены и проанализированы результаты для следующих двумерных материалов: MoS<sub>2</sub>, InSe, Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. Было выяснено, что все три материала плавятся по различным сценариям, и лишь плавление InSe включает в себя промежуточную фазу. В данной работе представлен анализ вычислительных экспериментов по плавлению широкого класса дихалькогенидов переходных металлов. С учетом природы сил взаимодействия выясняется модель, согласно которой происходит фазовый переход.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 20-52-50012).

1. Ландау Л. Д., ЖЭТФ, 7 (1937), 627; Собрание трудов, Т. 1, Наука, М., 1937, 253; Landau L., Phys. Z. Sowjetunion, 11 (1937), 545
2. Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids.(Application of dislocation theory) //Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1972. – Т. 5. – №. 11. – С. L124.
3. Kosterlitz J. M., Thouless D. J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems //Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1973. – Т. 6. – №. 7. – С. 1181.
4. Halperin B. I., Nelson D. R. Theory of two-dimensional melting //Physical Review Letters. – 1978. – Т. 41. – №. 2. – С. 121.
5. Nelson D. R., Halperin B. I. Dislocation-mediated melting in two dimensions //Physical Review B. – 1979. – Т. 19. – №. 5. – С. 2457.
6. Chui S. T. Grain-boundary theory of melting in two dimensions //Physical Review B. – 1983. – Т. 28. – №. 1. – С. 178.

## Исследование поведения водородных связей в эттрингите методом классической молекулярной динамики

Тарарушкин Е.В. \*, Писарев В.В., Калинин А.Г.

НИУ ВШЭ, Москва,

\*etararushkin@hse.ru

Эттрингит – гидросульфатоалюминат кальция ( $\text{Ca}_6[\text{Al}(\text{OH})_6]_2 [\text{SO}_4]_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,  $n=24-27$ ), является одной из важных минеральных фаз (AFt-фаза), образующихся при гидратации портландцемента. Изучение его свойств на атомистическом уровне имеет важное значение для химии цемента, поскольку эттрингит выступает в качестве источника сульфатной коррозии бетонов на основе портландцемента. Эттрингит имеет столбчатую кристаллическую структуру, которая ориентирована вдоль кристаллографического вектора  $c$ . Связь между столбиками обеспечивается водородными связями между гидроксильными группами, молекулами воды и тетраэдрами сульфат-анионов. При этом, молекулы воды располагаются как в столбиках эттрингита, так и в его каналах между сульфатами ионов.

Для моделирования цементных материалов на атомистическом уровне хорошо себя зарекомендовало силовое поле ClayFF [1], которое позволяет моделировать методом классической молекулярной динамики различные свойства таких систем в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными [2]. Новая модификация ClayFF [3], позволяет теперь более точно описывать угловое взаимодействие между атомом металла и гидроксильной группой (M–O–H) в структуре материалов. В структуре эттрингита присутствует два таких угла: Al–O–H и Ca–O–H. Анализ результатов моделирования кристалла эттрингита показал, что учет взаимодействий M–O–H в системе приводит к формированию более сильных водородных связей между гидроксильными группами и молекулами воды, что в свою очередь приводит к большей локализации атомов кристаллической фазы. Это также отразилось в колебательных спектрах эттрингита, где произошли изменения в либрационных колебаниях гидроксильных групп. В то же время, рассчитанные кристаллографические параметры элементарной решетки и плотность эттрингита остались практически неизменными между старой и новой версиями силового поля ClayFF, но точность воспроизведения упругих констант кристалла заметно улучшилась.

*Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ в 2019-2021 годах. Расчеты выполнялись на высокопроизводительном вычислительном кластере НИУ ВШЭ "CHARISMa".*

1. Cygan R.T., Liang J.-J., Kalinichev A.G. // J. Phys. Chem. B. 2004. V.108. P.1255-1266.
2. Kalinichev A.G., Kirkpatrick R. J. // Chem. Mater. 2002. V.14. P.3539-3549.
3. Pouvreau M., Greathouse J.A., Cygan R.T., Kalinichev A.G. // J. Phys. Chem. C. 2017. V.121. P.14757-14771.

## Уникальные свойства плазменно-пылевой системы

Тимофеев А.В.

НИУ ВШЭ, Москва,

timofeev@jih.ru

Пылевая плазма - ионизированный газ, содержащий макроскопические заряженные частицы. В такой системе наибольший интерес вызывают свойства пылевой компоненты, особенно в условиях, когда пылевые частицы приобретают значительный заряд и их взаимодействия становятся значительными. Пылевая подсистема может характеризоваться различными агрегатными состояниями - газообразным, жидким, кристаллическим, что позволяет исследовать процессы, происходящие в системе на кинетическом уровне.

Пылевые частицы в плазме газового разряда подвержены большому числу разнообразных элементарных процессов. Это приводит как к флуктуациям заряда и массы пылевых частиц, так и к их зависимости от окружения, так и изменению во времени. Заряд пылевой частицы влияет на окружающую плазму и взаимодействие с окружающими пылевыми частицами, что приводит к появлению параметрических неустойчивостей. Взаимодействие заряженной пылевой частицы с потоком ионов в условиях газового разряда приводит к появлению кильватерного потенциала, и развитию неустойчивости связанных мод и ряда других эффектов. Обозначенные выше эффекты в плазме передают анизотропию в пылевую подсистему. При изменении температуры разряда, расстояние между пылевыми частицами может упасть в несколько раз, что существенно корректирует набор явлений, определяющих свойства пылевой подсистемы.

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

В работе рассматриваются ряд свойств пылевой плазмы и явлений в ней, которые выглядят необычными и даже уникальным в физике обычного вещества. Исследование осуществлено в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

**Плазмоны с переносом заряда в комплексных системах из металлических наночастиц, соединенных молекулярными проводниками**

**Федоров А.С.<sup>\*1</sup>, Высотин М.А.<sup>1</sup>, Еремкин Е.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>ИФ СО РАН, <sup>2</sup>СФУ, Красноярск,

\*qchem99@yandex.ru

На основе оригинальной гибридной модели [1,2,3] исследованы плазмоны с переносом заряда ( Charge Transfer Plasmon -СТР) различной топологии и размерности (1D, 2D, 3D) в системах, состоящих из металлических наночастиц (nanoparticles - NPs), связанных узкими молекулярными мостиками. Исследованные комплексы рассматриваемых NPs представляют собой димеры и др. фигуры, а также нерегулярные комплексы из наночастиц. СТР в таких комплексах возникают из-за баллистического движения электронов в тонких молекулярных линкерах с чисто мнимой проводимостью - в отличие от случая обычных СТР, где металлические наночастицы связаны толстыми мостиками с реальной оптической проводимостью, которая проявляется благодаря рассеиванию свободных носителей. Данная гибридная модель учитывает кинетическую  $E_{kin}$  и потенциальную энергию  $E_{pot}$  носителей внутри линкеров и наночастиц, а также их кулоновские взаимодействия. В отличие от других методов расчета, эту методику можно использовать для расчета плазмонов в очень больших системах при сохранении достаточной точности. На примере расчета димера из двух наночастиц радиуса R, лежащих на расстоянии L друг от друга можно получить формулу

$$E_{tot} = E_{pot} + E_{kin} = \left( \frac{Q(t)^2}{R} - \frac{Q(t)^2}{2R+L} \right) + \frac{\alpha I(t)^2}{2}. \quad (1)$$

Предполагая отсутствие диссипации полной энергии  $E_{tot}$ , можно получить дифференциальное уравнение гармонических колебаний, содержащее квадрат модифицированной плазменной частоты:

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} = -\widetilde{\omega}_{pl}^2 Q(t); \quad \widetilde{\omega}_{pl}^2 = \left( \frac{1}{R} - \frac{1}{2R+L} \right) \frac{2}{\alpha} \quad (2)$$

В рамках модели для СТР в различных комплексах NPs выведены общее аналитическое или численное решение для частот плазмонов и показано, что частоты СТР лежат в ИК-области и зависят как от проводимости линкеров, так и от конкретной геометрии системы. Обнаружено, что электронные токи при плазменных колебаниях соответствуют очень малым зарядовым смещениям величиной всего нескольких зарядов электрона  $e$ . Установлено, что взаимодействие СТР с внешними электромагнитными полями сильно зависит от симметрии электронных токов в линкерах, которые, в свою очередь, полностью определяются симметрией рассматриваемой системы. Результаты расчетов частот СТР в рамках предложенной гибридной модели и полученные аналитические выражения для частот были протестированы путем сравнения полученных результатов с расчетами методом Finite Difference Time Domain (FDTD) для димеров и тримеров из сферических металлических NPs, соединенных узкими цилиндрами с мнимой проводимостью и реальной диэлектрической проницаемостью, что соответствует проводящим молекулярным мостикам. Результаты, полученные с помощью FDTD, показывают появление как обычных плазмонов с частотой в видимом диапазоне длин волн, близкой к частоте отдельных NPs, так и СТР с частотами в инфракрасной области, близкими к предсказанной в разработанной модели.

Работа была поддержана фондом РФФ N18-13-00363

1. 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
2. Thermoelectric and Plasmonic Properties of Metal Nanoparticles Linked by Conductive Molecular Bridges, physica status solidi (b) 2020-10-21
3. Charge-transfer plasmons with narrow conductive molecular bridges: A quantum-classical theory, The Journal of Chemical Physics, 2019-12-28

**Корреляционные функции высоких порядков в различных фазах**

**Флейта Д.Ю.**

НИУ ВШЭ, Москва,

tomysf@gmail.com

Точка фазового перехода в веществе, несмотря на её исключительное влияние на поведение вещества, не является особенной для его термодинамических функций [1,2]. Любая фаза может существовать, хотя бы как метастабильная, и по другую сторону от точки перехода; термодинамические неравенства в этой точке не нарушаются в пределах времени релаксации.

Целью нашего исследования является изучение микродинамики вещества в различных состояниях и фазах, в частности, в окрестности точек фазового перехода с помощью метода корреляционных функций высоких порядков [3,4]. В работах [5,6] продемонстрировано наличие особенности в области фазовых переходов у двухчастичных корреляторов движения, описывающих коллективную динамику частиц в различных модельных системах флюидов. Основным инструментом исследования была выбрана корреляционная функция вида:

$$CC(T, R) = \left\langle \frac{[\mathbf{r}_i(t+\tau) - \mathbf{r}_i(t)] \cdot [\mathbf{r}_k(t+\tau) - \mathbf{r}_k(t)]}{|\mathbf{r}_i(t+\tau) - \mathbf{r}_i(t)| \cdot |\mathbf{r}_k(t+\tau) - \mathbf{r}_k(t)|} \right\rangle_t. \quad (3)$$

В работах [7,8] поведение корреляторов движения, подобных описанному в работе [5], демонстрирует совсем иной характер в твердой и аморфной фазах. В твердых телах наблюдается анизотропия спектра распределения корреляций, а аморфная фаза демонстрирует признаки роста корреляций на дальнем порядке, что не присуще фазе с отсутствием трансляционной симметрии. Представлена физическая интерпретация изменения характера корреляций, а также радиальные зависимости поведения частиц. Также была проведена апробация метода оценки температуры витрификации, с оценочной температурой стеклования алюминия, согласующейся с другими методами анализа.

Работа подготовлена в ходе проведения работы в рамках Программы фундаментальных исследований Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики» (НИУ ВШЭ) и с использованием суперкомпьютерного комплекса НИУ ВШЭ.

1. Андреев А.Ф. // ЖЭТФ.1964. Т. 64(6), С.2064.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика - М.: Наука, 1976.
3. Волошин В.П., Маленков Г.Г., Наберухин И.Ю.// Журн. структ. химии. Т. 54(8). С.239.
4. Brazhkin V.V., Fomin Yu.D., Lyarin A.G., Ryzhov V.N., Tsiok E.N., Trachenko K. // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 111. P.145901.
5. Норман Г.Э., Флейта Д.Ю.// Письма в ЖЭТФ. 2019. Т. 109(10). С.689.
6. V. Negodin, Y. Polyachenko, D. Fleita, V. Pisarev, G. Norman // J. Mol. Liq. V. 322(1). P.114954.
7. Норман Г.Э., Писарев В.В., Флейта Д.Ю.// Письма в ЖЭТФ. 2020. Т. 111(4). С.251.
8. Fleita D.Iu., Norman G.E., Pisarev V.V. // J. Phys. Cond. Matt. 2020. V. 32. P. 214009.

### О формировании фазы Лавеса $C14$ и морфологии микроструктуры трех многокомпонентных высокоэнтропийных сплавов

Черепанова Л.А.\* , Упоров С.А., Эстемирова С.Х., Митрофанов В.Я.

ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург,

\*freefly88@mail.ru

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) - относительно новый класс материалов, представляющий собой твердые растворы, содержащие 5 или более элементов, взятых в эквивалентных соотношениях [1]. Высокая энтропия смешения, один из ключевых факторов, способствующих образованию однофазного неупорядоченного твердого раствора. Обнаружено, что все фазы Лавеса (кубическая  $C15$ , гексагональная  $C14$  и гексагональная сверхструктура  $C36$ ) способны образовывать многокомпонентные твердые растворы, что делает их перспективным для создания ВЭСов. Известно, что рассматриваемая в данной работе фаза Лавеса  $C14$  ( $RM_2$ ), характеризуется высокой симметрией, большими координационными числами и высокой плотностью упаковки атомов. Хотя плотнейшая упаковка в структуре  $C14$  достигается при соотношении атомных радиусов  $R/M = 1.225$ , реально это соотношение колеблется от 1.04 до 1.68 [2]. По-видимому, происходит взаимное «приспособление» атомов, в результате которого отношение эффективных радиусов в структурах фаз Лавеса всегда близко к идеальному. Наряду с геометрическим фактором, существенную роль в формировании устойчивой кристаллической структуры играет электронная структура: концентрация валентных электронов на один атом ( $\sim 2.32$ ) и степень заполнения 3d-состояний [3]. На основании подбора элементов по вышеуказанным условиям нами были разработаны и успешно синтезированы три мультикомпонентных сплава со структурой  $C14$ : один 12-компонентный сплав  $TiZrHfNbVCrMoMnFeCoNiAl$  (далее 12K) и два 13-компонентных сплава, которые содержали помимо элементов, входящих в вышеуказанный 12-компонентный Sc ( $TiZrHfNbVCrMoMnFeCoNiAlSc$ , далее 12K+Sc) и Be ( $TiZrHfNbVCrMoMnFeCoNiAlBe$ , далее 12K+Be). Расчет кристаллической структуры показал, что параметры элементарной ячейки уменьшались в ряду:  $(12K+Sc) \rightarrow 12K \rightarrow (12K+Be)$ , в соответствии с уменьшением среднего радиуса элементов, а соотношение параметров  $c/a$  было близко к идеальному для плотноупакованной структуры 1.633. В то же время, значения микродеформаций кристаллической структуры были чрезвычайно высокими и возрастали в указанном выше ряду. Все образцы имели хорошо выраженную дендритную структуру со значительным варьированием химического состава от центра к краям зерен и в междендритных пространствах. Работа поддержана Российским научным фондом (проект № 19-73-20053) на оборудовании центра коллективного пользования научным оборудованием Урал-М.

1. Amit S. Sharma, S. Yadav, K. Biswas, B. Basu // Mater. Sci. Eng. R, 2018. V. 131. P. 1-42.
2. Gurao N.P., Biswas K., Tazuddin J. // Alloy. Comp. 2017. V.697. P. 434-442.
3. Stein F., Palm M., Sauthoff G. // Intermetallics. 2004. V. 12. P. 713-720.

### Исследование электронной структуры и электронных корреляций соединения MnS

Чернов Е.Д.\* , Лукоянов А.В.,

ИФМ УрО РАН, Екатеринбург,

\*chernov\_ed@imp.uran.ru

Работа посвящена исследованию электронной структуры и электронных корреляций в бинарном соединении марганца MnS. В работе проведены теоретические исследования нескольких кристаллических фаз данного соединения, которые обладают различающимися транспортными и магнитными свойствами. В результате выполненных расчетов были получены электронная структура и магнитные свойства для трёх фаз исследуемого соединения:  $\alpha$ -MnS,  $\beta$ -MnS,  $\gamma$ -MnS. Фаза  $\alpha$ -MnS кристаллизуется в кубической структуре с пространственной группой  $Fm\bar{3}m$ ,  $\beta$ -MnS – в кубической структуре  $F\bar{4}3m$ , а  $\gamma$ -MnS – в гексагональной структуре  $P6_3mc$ . Для исследования электронной структуры были проведены расчеты в пакете программ Quantum ESPRESSO с использованием метода DFT+U. Для учета сильных электронных корреляций в 3d оболочке Mn были использованы несколько величин параметра прямого кулоновского взаимодействия U и параметра обменного (хундовского) взаимодействия J. В результате первопринципных расчетов было обнаружено, что фазы  $\alpha$ -MnS и  $\gamma$ -MnS при всех трех заданных значениях кулоновского параметра проявили себя как диэлектрик, в отличие от фазы  $\beta$ -MnS, для которой электронная структура имеет вид, характерный для металлов.

**Возбуждение и распространение ударных волн в фосфорене**  
**Шепелев И.А.<sup>\*1</sup>, Колесников И.Д.<sup>1</sup>, Корзникова Е.А.<sup>2</sup>, Дмитриев С.В.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, <sup>2</sup> ИПСПМ РАН, УФА,  
*\*igor\_sar@li.ru*

Работа посвящена детальному моделированию процессов возбуждения и распространения ударных волн в двумерной гексагональной решетке черного фосфорена методами молекулярной динамики. Для описания межатомного взаимодействия используется потенциал Стиллинджера-Вебера с значениями параметров, соответствующим фосфорену. Мы проводим детальный анализ количественных структурных параметров и каналов рассеяния энергии материала, подвергнутому высокоинтенсивной ударной нагрузке. Обнаружено, что для возбуждения ударной волны достаточно подать направленный начальный импульс на атомный ряд в направлении, нормальном к этому ряду. В то же время эти начальные условия не соответствуют стабильному профилю ударной волны, и она формируется после достаточно короткого переходного периода 0,1 - 2 пс. Показано, что ударные волны в фосфорене могут распространяться только в двух кристаллографических направлениях, а именно по зигзагу или креслу. Во всех случаях ударные волны распространяются быстрее скорости звука с достаточно высокой диссипацией энергии волны. Для понимания механизма распространения, а также точного определения каналов рассеивания энергии были рассчитаны изменения валентных углов при распространении ударной волны, а также эволюция частоты их колебаний во времени и пространстве.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук МК-815.2020.2

**Машинное обучение и атомистическое моделирование**

**Щелкачев Н.М.<sup>\*1</sup>, Рыльцев Р.Е.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> ИФВД РАН, Троицк, <sup>2</sup> ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург,  
*\*n.chtchelkatchev@gmail.com*

Особое место занимает наука о материалах. Если в 20 веке моделирование считалось “второсортным”, на фоне так называемой теоретической физики, с аналитическим вычислением диаграмм и функциональных интегралов. В 21 веке все поменялось. Теоретическая физика конденсированного состояния стремительно превращается в музейную науку, а квантовая химия, молекулярное моделирование выходит в лидирующие позиции в мировой науке ввиду развития цифровых технологий и возможности эффективно моделировать новые материалы.

Одна из наиболее актуальных задач на стыке физики и химии – переход к передовым цифровым способам конструирования современных функциональных материалов и создание систем обработки больших объемов данных, с использованием машинного обучения и искусственного интеллекта.

Многокомпонентные сплавы, в том числе высокоэнтропийные и сложные по составу, являются предметом интенсивных исследований из-за их необычных физических свойств и перспектив применения. Из-за огромного количества возможных составов в таких сплавах большое значение имеют методы прогнозирования их структуры и свойств. Одним из основных теоретических инструментов на этом пути является *ab initio* моделирование, которое позволяет рассматривать как атомную, так и электронную структуру и вычислять наблюдаемые свойства с экспериментальной точностью. Однако такое моделирование многокомпонентных сплавов является чрезвычайно сложной задачей.

Перспективным способом решения этой проблемы является использование машинного обучения (ML) для ускорения компьютерного моделирования. Основная идея состоит в том, чтобы правильно подогнать поверхность межатомной потенциальной энергии системы частиц с использованием эталонных данных *ab initio*. Правильно спроектированный межатомный потенциал машинного обучения (MLIP) может обеспечить точность, близкую к *ab initio*, с на порядки меньшими вычислительными затратами. Со времени пионерских работ в конце 2000-х годов [1,2] к настоящему времени был предложен ряд подходов к созданию MLIP, которые успешно применяются для исследования систем конденсированных сред различной природы [3-4]. Однако применение этих методов для исследования многокомпонентных сплавов еще не получило должного подтверждения. На этом пути возникает множество вопросов: 1) Как правильно сгенерировать обучающий набор конфигураций *ab initio*? 2) Какая лучшая модель машинного обучения для описания многокомпонентных систем? 3) Возможно ли разработать MLIP, который адекватно описывает систему с множеством (скажем, более шести) компонентов? 4) Можно ли экстраполировать область термодинамических параметров, доступную для моделирования, далеко за пределы обучающего набора данных? Мы решаем эту задачу для ряда металлических многокомпонентных сплавов, включая тройные сплавы Al-Cu- (Fe, Ni) и высокоэнтропийные сплавы TiZrHfNbCoNiAl и TiZrHfNbVCrMoMnFeCoNiAl на основе нейронных сетей tensorflow и пакета DeePMD [4]. Для сплавов Al-Cu- (Fe, Ni) нейросети тренировались на нескольких составах, покрывающих тройной композиционный треугольник. Это позволило описать как атомную структуру, так и динамику системы во всем диапазоне составов и в широком диапазоне температур. Разработанные потенциалы обеспечивают хорошую точность структурных и динамических свойств сравнимую с *ab initio*. Это первый пример построения нейросети для сплавов с таким большим количеством компонентов. Полученные результаты открывают перспективы для моделирования структурных и динамических свойств многокомпонентных сплавов с помощью MLIP. Благодарим за поддержку Российский научный фонд (№ 18-12-00438).

1. J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146401 (2007).
2. A. P. Bartók, M. C. Payne, R. Kondor, and G. Csányi, Phys. Rev. Lett. 104, 136403 (2010).
3. R. Jinnouchi, J. Lahnsteiner, F. Karsai, G. Kresse, et al, Phys. Rev. Lett. 122, 225701 (2019).
4. L. Zhang, D.-Y. Lin, H. Wang, R. Car, and W. E, Phys. Rev. Materials 3, 023804 (2019).

## ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

*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,  
*ИМЕТ УрО РАН* — Институт металлургии Уральского отделения РАН, Екатеринбург,  
*ИПСИМ РАН* — Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа,  
*ИТ СО РАН* — Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе Сибирского отделения РАН, Новосибирск,  
*ИФМ УрО РАН* — Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения РАН, Екатеринбург,  
*НИЯУ МИФИ* — Национальный исследовательский ядерный университет Московский инженерно-физический институт, Москва,  
*МФТИ* — Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный,  
*НГАСУ* — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск,  
*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,  
*РГПУ им. А. И. Герцена* — Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена, Санкт-Петербург,  
*СФУ* — Сибирский федеральный университет, Красноярск,  
*ФГУП ВНИИА* — Федеральное государственное унитарное предприятие “Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова”, Москва  
*ЮУрГУ* — Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет), Челябинск.