

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  
15-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, Москва  
Стегайлов В.В., сопредседатель, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва  
Тимофеев А.В., зам. председателя, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва  
Даутия Ф.Т., зам. председателя, глава Администрации г. Новый Афон, Абхазия  
Кондратюк Н.Д., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва  
Орехов М.А., учёный секретарь, ОИВТ РАН/НИУ ВШЭ, Москва  
Гельчинский Б.Р., Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург  
Губин С.А., Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва  
Ефремов Р.Г., ИБХ РАН/НИУ ВШЭ, Москва  
Овчинников С.Г., ИФ СО РАН/СФУ, Красноярск  
Псахье С.Г., Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск  
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/afon18>

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

Благодарим Н. Д. Кондратюка, Д. Ю. Ленева, В. С. Николаева, В. П. Никольского и М. А. Орехова за помощь при подготовке сборника тезисов к изданию.

В сборнике представлены тезисы докладов 15-го Российского симпозиума «Фундаментальные основы атомистического многомасштабного моделирования» (Новый Афон, 15-26 августа 2018 г.) Симпозиумы 2015-2018 гг. являются продолжением серии симпозиумов по проблемам физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах, проводившихся в 2003-2013 годы.

Как и в 2015-2017 гг., специфика Симпозиума предполагает рассмотрение широкого вопросов, в которых анализируется динамика процессов в конденсированном веществе на молекулярном уровне и/или связываются мезо- и макроскопические подходы с молекулярными процессами. Междисциплинарность симпозиума позволяет рассматривать с единых позиций задачи, относящиеся к разным областям науки: физике, химии, биологии, инженерных наук и computer science. Симпозиум даёт прекрасную возможность для проведения научных дискуссий в неформальной обстановке, появления коопераций среди учёных.

Оригинальные доклады принимаются 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

### Секция 1. «Низкотемпературная плазма»

<u>Колотинский Д.А., Тимофеев А.В.</u> Моделирование эффекта ion wake методом решеточных уравнений Больцмана - шаг к многомасштабному моделированию пылевой плазмы. . . . .	5
<u>Куриленков Ю.К., Самойлов И.С., Сметанин И.В., Карпухин В.Т.</u> Особенности выхода рентгеновского излучения из межэлектродной среды наносекундного вакуумного разряда с виртуальным катодом . . . . .	5
<u>Ланкин А.В.</u> Влияние эффектов плотности на интенсивность спектральных линий в плотной плазме . . . . .	6
<u>Николаев В.С., Тимофеев А.В.</u> Влияние тлеющего разряда на структурные свойства плазменно-пылевых кристаллов в широком диапазоне температур . . . . .	6
<u>Решетняк В.В., Филиппов А.В.</u> Теоретическое исследование равновесных свойств жидкости Юкавы в широком диапазоне параметров . . . . .	7
<u>Тимофеев А.В.</u> Энтропия в плазменно-пылевой системе . . . . .	7

### Секция 2. «Конденсированное состояние»

<u>Воробьев А.С., Галашев А.Е.</u> Первопринципные расчёты взаимодействия двумерного сульфида молибдена (MoS <sub>2</sub> ) с графитовой подложкой в температурном диапазоне от 250 до 550К. . . . .	8
<u>Иванчикина К.А., Галашев А.Е.</u> Компьютерное изучение термической устойчивости монослойной пленки дисульфида молибдена на алмазной подложке . . . . .	8
<u>Костенко М. Г., Рыльцев Р. Е., Щелкачев Н. М., Ремпель А. А.</u> Разнообразие полиморфных модификаций и вариантов атомно-вакансионного упорядочения в монооксиде титана: дальний, ближний порядок и структурная наследственность . . . . .	9
<u>Фомин Ю.Д., Гайдук Е.А., Циок Е.Н., Рыжов В.Н.</u> Фазовая диаграмма двумерной системы сфер Герца. . . . .	9
<u>Шарипов З.А., Батгэрэл Б., Димова С.Н., Пузынин И.В., Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Христов И.Г., Христова Р.Д.</u> Молекулярно-динамическое моделирование эффекта дальнего действия в металлах при облучении нанокластерами . . . . .	10

### Секция 3. «Процессы переноса»

<u>Барсукова А.А., Левашов П.Р., Минаков Д.В.</u> Оценка энтропии в молекулярно-динамическом моделировании на основе двухфазной модели с потенциалом мягких сфер . . . . .	11
<u>Кондратьев Н.Д., Писарев В.В.</u> Расчет сдвиговой вязкости жидких углеводородов с помощью методов молекулярной динамики . . . . .	11
<u>Ленёв Д.Ю., Норман Г.Э.</u> Коэффициенты термической аккомодации и теплоотдачи для наночастиц Fe в атмосфере Ag . . . . .	12
<u>Орезов М.А.</u> Эффективные методы расчета коэффициентов диффузии в растворах . . . . .	12
<u>Рудяк В.Я.</u> Молекулярно-динамическое моделирование коэффициентов переноса газов и жидкостей . . . . .	13

### Секция 4. «Белки и биомембраны»

<u>Козлов М.И., Поддубный В.В.</u> Пути переноса энергии между хромофорами фотоантенны ЛНСП . . . . .	14
<u>Кузнецов А.С., Ефремов Р.Г.</u> Структурно-динамические характеристики белок-липидных взаимодействий в модельных биомембранах . . . . .	14
<u>Свидерская К.С., Панина И.С., Ефремов Р.Г.</u> Структурно-динамическая модель комплекса укороченного аналога низина с фрагментом липида II . . . . .	14
<u>Трофимов Ю.А., Крылов Н.А., Ефремов Р.Г.</u> Атомистическое моделирование поведения молекул воды в ионном канале TRPV1 . . . . .	15

### Секция 5. «Плазменный фазовый переход»

<u>Норман Г.Э., Саитов И.М.</u> Плазменный фазовый переход (к 50-летию предсказания) . . . . .	16
<u>Сартан Р.А., Норман Г.Э., Саитов И.М.</u> Метастабильные состояния разогретого плотного водорода . . . . .	17
<u>Старостин А.Н., Грязнов В.К., Филиппов А.В.</u> Фазовые переходы в плотной плазме водорода при давлениях мегабарного диапазона . . . . .	17
<u>Федоров И.Д., Орезов Н.Д., Стегайлов В.В.</u> Применение ab initio метода волновых пакетов к моделированию плазменного фазового перехода плотного водорода . . . . .	17

### Секция 6. «Квантовое моделирование»

<u>Захарова А.В., Бедрина М.Е.</u> Структура и электронные свойства эндокомплексов гадолиния с фуллереном . . . . .	19
<u>Ломачук Ю.В., Мальцев Д. А., Мосягин Н. С., Демидов Ю.А., Зайцевский А. В., Титов А. В.</u> Кластерная модель кристалла ксенотима YPO <sub>4</sub> . . . . .	19
<u>Мальцев Д. А., Ломачук Ю.В., Скрипников Л.В., Демидов Ю.А., Мосягин Н.С., Зайцевский А.В., Титов А.В.</u> Модель потенциала встраивания кластера в кристалл для ферсмита и её применение для расчёта свойств атомов-в-соединении на ниобии. . . . .	20
<u>Норман Г.Э., Саитов И.М.</u> Механизм образования проводящей фазы твердого водорода при высоких давлениях . . . . .	20
<u>Просняк С. Д., Скрипников Л. В.</u> Вычисление поправки Бора-Вайскопфа для атома таллия . . . . .	21
<u>Стегайлов В.В.</u> Проблемы ab initio моделирования разогретого плотного вещества . . . . .	21

<i>Титов А.В., Мосягин Н.С., Мальцев Д.А., Ломачук Ю.В., Шахова В.М., Скрипников Л.В.</i> Метод псевдопотенциала как универсальный инструмент для расчета молекул и твердых тел с тяжелыми переходными металлами, лантанидами и актинидами . . . . .	21
<i>Федоров А.С., Высотин М.А.</i> Теоретические исследования наноструктур для их применения в качестве наноструктурированных термоэлектрических материалов . . . . .	22
<i>Филиппов А.В., Старостин А.Н., Грязнов В.К.</i> Квантово-механическое рассмотрение рассеяния электронов в плотной и вырожденной плазме на основе метода фазового сдвига . . . . .	22
<i>Шахова В.М., Ломачук Ю.В., Мосягин Н.С., Мальцев Д.А., Скрипников Л.В., Зайцевский А.В., Титов А.В.</i> Построение потенциала встраивания в кристалл для фторидов иттербия . . . . .	23
<b>Секция 7. «Высокопроизводительные вычисления»</b>	
<i>Ланкин А.В.</i> Квантовые симуляторы . . . . .	24
<i>Ланкин А.В.</i> Квантовые компьютеры: проблемы и перспективы . . . . .	24
<i>Никольский В.П., Стегайлов В.В.</i> Распараллеливание вычислений и энергоэффективность микропроцессорных архитектур для суперкомпьютеров эксафлопсного уровня производительности: пример архитектуры Эпифани . . . . .	25
<b>ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ</b> . . . . .	26
<b>ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ</b> . . . . .	27

Моделирование эффекта ion wake методом решеточных уравнений Больцмана - шаг к многомасштабному моделированию пылевой плазмы.

Колотинский Д.А., Тимофеев А.В.\*

ОИВТ РАН, Москва,

\*kolotinsky.daniil@yandex.ru

Пылевая плазма является многопараметрической системой со сложным видом взаимодействия между пылевыми частицами. К тому же, оказывается невозможным прямое экспериментальное определение типа и параметров этого взаимодействия. Эти факторы существенно ограничивают методы сопоставления результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными. Доступными оказываются только косвенные методы сравнения, такие как, например, сравнение структуры пылевой компоненты, полученной при компьютерном моделировании, с картиной, наблюдаемой в эксперименте. Однако для получения таких структур при моделировании является необходимым учет наиболее существенных эффектов и сил, действующих в пылевой плазме, к ним относятся: сила тяжести, действующая на пылевую частицу, электрическая сила взаимодействия с ловушкой, потенциал межчастичного взаимодействия, сила трения, термодиффузионная сила, сила ионного увлечения и эффект ion wake [1]. Основной проблемой, препятствующей проведению моделирования, является длительное время такого расчета, обусловленное сложностью подзадач, необходимых для решения на каждом шаге интегрирования. Одной из таких подзадач является расчет эффекта ion wake. На данный момент существует несколько моделей, качественно правильно описывающих этот эффект: модель PIC [2] и [3]. К сожалению, данные методы являются чересчур затратными в плане расчетного времени и не годятся для использования в алгоритме программы, описывающей поведение всей системы. Однако существуют и менее затратные методы, например: LR-приближение [2] и решение кинетического уравнения для ионов и электронов вблизи пылевой частицы при соответствующем упрощении [4]. Последний метод является одним из самых современных и перспективных методов по данной тематике. На текущий момент в моделировании пылевой плазмы использовался только самый простой подход заряженной точки, описанный в [5].

В данной работе для качественного и количественного учета эффекта ion wake и расчета получающегося потенциала используется численное решение кинетического уравнения методом решеточных уравнений Больцмана [6]. Такой подход к учету ion wake в моделировании пылевой плазмы методом молекулярной динамики позволяет уточнить модель и приблизиться к объяснению экспериментальных данных, не имеющих на текущий момент объяснения.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-50-00124).

1. Фортов В.Е., Храпак А.С., Храпак Г.А., Молотков В.И., Петров О.Ф. Пылевая плазма // Успехи физических наук. 2004. Т 174, №8. С 495-513.
2. Ludwig P., Miloch W.J, L., Kahlert H., Bonitz M. On the wake structure of streaming complex plasmas // New Journal of Physics. 2012.
3. V. A. Schweigert, I. V. Schweigert, A. Melzer, A. Homann, A. Piel. Alignment and instability of dust crystals in plasmas // physical review E. 1996. P. 4155-4166
4. Kompaneets R., Morfill G.E., Ivlev A.V. Wakes in complex plasma: self-consistent kinetic theory // Physical review E. 2016. V. 063201. P. 1-8.
5. Швейгерт В., Швейгерт В. А., Бедонов В. М. Неустойчивость и плавление кристалла макрочастиц ЖЭТФ. 1998, том 114, вып. 5(11), стр. 1672-1690.
6. Chen S., Doolen G. D. Lattice Boltzmann method for fluid flows // Annual review of fluid mechanics. – 1998. – Т. 30. – №. 1. – С. 329-364.

Особенности выхода рентгеновского излучения из межэлектродной среды наносекундного вакуумного разряда с виртуальным катодом

Курilenков Ю.К.<sup>1,\*</sup>, Самойлов И.С.<sup>1</sup>, Сметанин И.В.<sup>2</sup>, Карпухин В.Т.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ОИВТ РАН, <sup>2</sup>ФИАН, Москва,

\*kurilenkovyuri@gmail.com

Ранее в миниатюрном наносекундном вакуумном разряде (НВР) с виртуальным катодом и глубокой потенциальной ямой были продемонстрированы интенсивная генерация DD нейтронов и жёсткого рентгеновского излучения [1,2]. В результате взаимодействия пучков автоэмиссионных электронов с поверхностью анода в межэлектродном пространстве формируется полидисперсная плазменная среда (содержащая нано- и микрочастицы различного размера из материала анода), которая обуславливает малую (по сравнению с размером плазмы) длину свободного пробега рентгеновских квантов [2]. Эксперимент обнаруживает частичное «запирание» рентгеновского излучения межэлектродными ансамблями нанокластеров, которое возрастает с увеличением плотности и уменьшением размеров кластеров, а также при самоорганизации ансамблей [3]. Зарегистрированы и обсуждаются высокоинтенсивные вспышки рентгеновского излучения, которые могут быть интерпретированы как результат формирования импульсов усиленного спонтанного излучения в допороговом режиме лазера со стохастической обратной связью [4,5]. Диффузия и «запирание» именно довольно жёстких рентгеновских квантов (3-8 кэВ) в объёме межэлектродной среды нанокластеров (нанокристаллов), а также наработка излучения по объёму лишь при потерях с поверхности, ранее в других экспериментах не наблюдались. Обнаруженные эффекты, принципиально лежащие в основе работы стохастического лазера [4,5] в рентгеновском диапазоне, могли бы быть предметом атомистического моделирования.

Эксперимент и моделирование генерации DD нейтронов поддержаны грантом РФФ No. 14-50-00124, диагностика выхода жёсткого рентгена поддержана грантом РФФИ No. 15-08-08720a.

1. Yu.K. Kurilenkov, V.P. Tarakahov, S.Yu. Gus'kov et al. J. Phys. A: Math Theor 42 (2009) 214041.
2. Yu.K. Kurilenkov, V.P. Tarakahov, S.Yu. Gus'kov et al. Contrib. Plasma Phys. 51 (2011), No. 5, 427 – 443.

3. Yu.K. Kurilenkov, V.P. Tarakahov, S.Yu. Gus'kov et al. J. Phys.: Conf. Ser. 653 (2015) 012026.
4. V.S. Letokhov. Sov. Phys. JETPh 26 (1968) 835; Quantum Electronics 32 (2002) 1065.
5. D. S.Wiersma. Nature Physics 4 (2008) 359.

### **Влияние эффектов плотности на интенсивность спектральных линий в плотной плазме**

*Ланкин А.В*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*alex198508@yandex.ru*

В работе на основании обобщения результатом классического молекулярно-динамического моделирования для парных связанных состояний в неидеальной плазме рассмотрена зависимость статистического веса атомных уровней от параметров плазмы. Показано, что в том случае, если энергия ионизации электрона со связанного уровня меньше  $5kT$ , то его статистический вес существенно снижен по сравнению с его значением для свободного атома. При этом образование уровней с энергией ионизации менее  $2kT$  полностью подавляется. При этом вид функции отношения статистического веса атома в плазме к статистическому весу уровня свободного атома определяется только плотностью плазмы и не зависит от её температуры. Получена интерполяционная формула для её описания. Показана связь снижения статистического веса возбуждённого состояния в плотной неидеальной плазме с величиной электрических микрополей в ней. Осуществляется сравнение предложенного соотношения со спектроскопическими данными для атома гелия в плотной плазме.

Работа выполнена при поддержке по гранту РНФ № 18-19-00734.

### **Влияние тлеющего разряда на структурные свойства плазменно-пылевых кристаллов в широком диапазоне температур**

*Николаев В.С.\* , Тимофеев А.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*vladorussia@mail.ru*

Параметры возникающих в численных экспериментах атомарных структур являются одним из надёжных ориентиров при тестировании используемых моделей взаимодействия при помощи ММД (метода молекулярной динамики). В данной работе этот подход применяется к макроскопической системе, состоящей из микронных частиц в плазме (пылевой плазме).

В экспериментах [1,2] измерялось среднее расстояние между пылевыми частицами в наблюдаемых структурах в диапазоне температур  $4.2 \div 300$  К. Показано, что по порядку межчастичное расстояние составляет от нескольких десятков до нескольких сотен микрон, наблюдалось как уменьшение расстояния при охлаждении системы, так и его резкое увеличение при низких температурах.

В данной работе плазменно-пылевые структуры исследуются при помощи метода решения уравнений движения пылевых частиц, аналогичного ММД, с использованием усложнённой модели взаимодействия пылинок. К потенциалам экранированному кулоновскому и ловушки добавляются также радиальная термофоретическая сила, сила ионного затенения и затенения нейтралами [3].

Показано, что усложнённая модель взаимодействия позволяет описать все значения межчастичного расстояния, наблюдающиеся в экспериментах. Выявлена сильная зависимость межчастичного расстояния от температуры окружающего газа и концентрации ионов в нём. Обнаружено, что при низких температурах термофорез и сила ионного затенения конкурируют с силой притяжения ловушки и отталкивающей кулоновской силой.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-50-00124).

1. Antipov S. N., Asinovskii E.I., Kirillin A.V. et al. // J. Exp. Theor. Phys. 2008. V.106. N.4. P.830.
2. Samoilov I. S., Baev V.P., Timofeev A.V. et al. // J. Exp. Theor. Phys. 2017. V.124. N.3. P.496-504.
3. Николаев В.С., Тимофеев А.В. // ЖЭТФ. 2018 (отправлена в редакцию)

# Теоретическое исследование равновесных свойств жидкости Юкавы в широком диапазоне параметров

Решетняк В.В.\*, Филиппов А.В.

ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк,

\*victor.reshetnyak84@gmail.com

Модель системы частиц Юкавы широко используется для описания свойств пылевой компоненты комплексной плазмы [1-3]. Взаимодействие между частицами при этом описывается формулой для экранированного кулоновского потенциала (потенциала Юкавы):

$$u(r_{ij}) = \frac{u_0}{r_{ij}} e^{-\frac{r_{ij}}{\lambda_D}},$$

где  $r_{ij}$  — расстояние между частицами с индексами  $i$  и  $j$ ;  $u_0$  — параметр, определяющий величину кулоновского взаимодействия частиц;  $\lambda_D$  — длина дебаевского экранирования.

Свойства систем Юкавы могут быть описаны с использованием приведенных параметров потенциала: параметра неидеальности  $\Gamma = \beta u_0 / \delta$  и дебаевского экранирования  $\kappa = \delta / \lambda_D$ . Здесь  $\beta - 1 = k_B T$ ,  $k_B$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура,  $n$  — концентрация частиц,  $\delta = n^{-1/3}$  — радиус ячейки Вигнера-Зейтца.

В настоящей работе проведены теоретические исследования равновесных свойств системы частиц Юкавы в неупорядоченном состоянии. Выполнен анализ структуры жидкости, основанный на результатах расчетов функции радиального распределения и статического структурного фактора, а так же параметров ориентационного порядка  $q_4$  и  $q_6$  [4]. Вычислены значения термодинамических потенциалов. Результаты получены в широком диапазоне значений эффективного параметра неидеальности  $\Gamma^* = \Gamma(1 + \kappa + 0.5\kappa^2)e^{-\kappa}$ , который изменялся от 0 до 155, и параметра дебаевского экранирования  $\kappa$  от 1 до 5. Температура системы считалась постоянной и равной 300 К.

Приближенные вычисления осуществлялись с использованием двух подходов, в основе которых лежат различные допущения. В первом методе броуновской динамики определялись траектории и скорости частиц, для которых вычислялись средние значения параметров. Во втором решалось уравнение Орнштейна-Зернике (ОЦ) и вычислялась радиальная функция распределения системы частиц. Для замыкания уравнения ОЦ использовалось гиперцепное приближение.

Результаты расчетов разными методами совпадают между собой с высокой точностью во всем диапазоне значений  $\Gamma^*$  и для всех  $\kappa$ . Анализ локальной структуры жидкости свидетельствует о возможном переходе в стекольную фазу при больших  $\Gamma^*$ . Перехода в кристаллическую фазу (ОЦК или ГЦК) при этом не наблюдалось из-за ограничений модели, связанных с размером ансамбля и временем моделирования. Зависимость свободной энергии и давления от  $\Gamma^*$  непрерывна во всем диапазоне значений параметров. Установлено, что давление при этом принимает только положительные значения.

1. Fortov V.E., Morfill G.E. Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space. Taylor & Francis, 2009.
2. Shukla P.K., Mamun A.A. Introduction to Dusty Plasma Physics. CRC Press, 2015.
3. Цытович В.Н. // УФН. 2015. Т.185. N 2. С.161.
4. Steinhart P.J., Nelson D.R., Ronchetti M. // Phys. Rev. B. 1983. V.28. N 2. P.784

## Энтропия в плазменно-пылевой системе

Тимофеев А.В.

НИУ ВШЭ, ОИВТ РАН, Москва,

mail.timofeev.av@gmail.com

Пылевая плазма представляет собой ионизованный газ, содержащий частицы конденсированного вещества. Пылевая подсистема может характеризоваться различными агрегатными состояниями - газообразным, жидким, кристаллическим, и в то же время размеры пылевых частиц и плазменно-пылевых систем позволяют исследовать процессы, происходящие в системе, на кинетическом уровне. Одной из характеристик позволяющих описать процессы, происходящие в системе, является энтропия. Данная работа посвящена оценке величины энтропии пылевой подсистемы в модели пылевой плазмы.

На основе разбегания траекторий вычисляется К-энтропия (энтропия Крылова-Колмогорова-Синяя). Проведено сравнение полученной величины с оценкой энтропии Шеннона. обсуждается вопрос близости полученных значений к энтропии системы.

Доклад подготовлен в ходе 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».

**Первопринципные расчёты взаимодействия двумерного сульфида молибдена ( $\text{MoS}_2$ ) с графитовой подложкой в температурном диапазоне от 250 до 550K**

*Воробьёв А.С.\* , Галашев А.Е.*

*ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, 17*

*\*alex2006-91@mail.ru*

В равновесном состоянии  $\text{MoS}_2$  имеет прямую запрещенную зону, величина которой в К-точке составляет 1.72 эВ. Однако при деформировании  $\text{MoS}_2$  становится полупроводником с непрямой запрещенной зоной. Кроме того, при удлинении в нем может происходить переход полупроводник–металл. Наличие непрямой запрещенной зоны и фазового перехода в значительной степени ограничивают применение монослоя  $\text{MoS}_2$  в электронных и оптических устройствах. В рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн исследовано изменение электронной структуры плоского сульфида молибдена без подложки и на графитовой подложке в зависимости от температуры. В рамках обобщенного градиентного приближения в форме PBE произведена геометрическая оптимизация с использованием программного комплекса Siesta. Динамическую релаксацию атомов проводили до тех пор, пока изменение полной энергии системы не становилось меньше 0.00001 эВ. Энергию обрезания базиса плоских волн полагали равной 500 Ry. Расчеты электронной структуры осуществляли интегрированием в зоне Бриллюэна с использованием k-сетки, построенной по методу Монкхорста-Пака. Размерность k-сетки составляла  $8^*8^*8$ . Зонная структура всех рассмотренных систем рассчитана в направлении Г-К-М-Г. После геометрической оптимизации, произведённой для  $\text{MoS}_2$  без подложки и на графитовой подложке, были выполнены молекулярно-динамические расчеты с использованием алгоритма Нозе-Хувера в диапазоне температур от 250 K до 550 K с шагом в 50 K.

Было установлено, что 1) согласно рассчитанной зонной структуре автономный плоский сульфид молибдена представляет собой полупроводник с шириной запрещённой зоны 1.86 эВ, что согласуется с экспериментальными результатами полученными в работе [1]; зонная структура  $\text{MoS}_2$  на графитовой подложке имеет ширину прямой запрещённой зоны 1.05 эВ, а барьер для непрямого перехода полупроводник - проводник составляет 0.89 эВ; 2) не было обнаружено изменения ширины запрещённой зоны в зависимости от температуры, 3) энергия когезии, вычисляемая между листом  $\text{MoS}_2$  и графитовой подложкой, уменьшается от -0.82 эВ при 250 K до -1.516 эВ при 550 K, что связано со структурными перестановками поверхности полупроводника, сопровождающимися адсорбцией; 4) расстояние между графитовой подложкой и нижней поверхностью, сформированной атомами серы, увеличивается на 7.46 % при изменении температуры от 250K до 550K.

Работа выполнена при финансовой поддержке по программе УрО РАН (грант № 18-10-3-31).

1. Mak K.F., Lee C., Hone J., Shan J., Heinz T.F. // Physical Review Letter. 2010. V.105. P.136805.

**Компьютерное изучение термической устойчивости монослойной пленки дисульфида молибдена на алмазной подложке**

*Иванчиккина К.А.\* , Галашев А.Е.*

*ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, 17*

*\*ksjushajan@gmail.com*

Тонкие пленки дисульфида молибдена могут использоваться в литий-ионных аккумуляторах, гибких электронных устройствах и фотолюминесценции. Электронные устройства, основанные на  $\text{MoS}_2$ , имеют сверхнизкую диссипацию мощности и высокую мобильность. Сложность исследования структуры и устойчивости монослойного  $\text{MoS}_2$  связана с зависимостью свойств пленки  $\text{MoS}_2$  от условий экспериментального синтеза.

Нами проведено компьютерное исследование термической устойчивости и структуры монослойного  $\text{MoS}_2$  на алмазной подложке методом молекулярной динамики. В качестве потенциалов, описывающих ковалентное взаимодействие в пределах слоя дисульфида молибдена, был выбран потенциал Стиллинджера-Вебера. Взаимодействие « $\text{MoS}_2$  – алмаз» описывалось потенциалом Морзе. Начальное состояние пленки  $\text{MoS}_2$  на алмазе в условиях NPT ансамбля с минимумом  $H(t)$ , где  $H$  – энтальпия системы, было достигнуто в течение 100000 временных шагов (или 10 пс). Далее, на протяжении 40 пс, система нагревалась до заданной температуры (250, 300, 350, ..., 550 K). Затем, система пребывала в свободном состоянии в баростате Нозе-Гувера в течении 50 ps. В этом временном диапазоне были рассчитаны температурные зависимости изобарной теплоемкости  $C_p(T)$ , удельной внутренней энергии ( $\langle U \rangle / N$  эВ) для слоя  $\text{MoS}_2$ , определена парциальная функция радиального распределения атомов S относительно атомов Mo. Местоположение пиков (0.26 и 0.42 nm) этой функции не изменялось при значениях температуры, взятых из исследуемого диапазона. С ростом температуры происходит уширение пиков и снижение их интенсивности. По мере увеличения температуры происходило отслаивание монослойного  $\text{MoS}_2$  от алмазной подложки. Если изначально расстояние между  $\text{MoS}_2$  и материалом подложки составляло 0.351 nm, то уже при температуре 350 K слой  $\text{MoS}_2$  отделился от подложки еще на 0.2 nm и стал деформироваться. Повышение температуры вызывало увеличение удельной внутренней энергии  $\text{MoS}_2$ , что свидетельствует о постепенном разупорядочении системы. Начальное состояние системы при 200 K характеризуется величиной теплоемкости  $C_p = 32.4$  Дж/моль·К. Эта величина согласуется с имеющимися экспериментальными данными автономного монослойного  $\text{MoS}_2$  при 300 K - 30.76 Дж/моль·К [1]. Согласно термическому критерию устойчивости  $T / C_p > 0$  устойчивость системы « $\text{MoS}_2$  на алмазной подложке» монотонно уменьшается с ростом температуры и заходит в область отрицательных значений при  $T = 550$  K.

Таким образом, результаты исследования показали, что монослойная пленка  $\text{MoS}_2$  на алмазной подложке не может использоваться в электронных устройствах при температурах выше 500 K.

Работа выполнена при финансовой поддержке по программе УрО РАН (грант № 18-10-3-31).

1. Amreen B. // Journal of Physics: Conference Series. 2017. V.836. P.012052.

## Разнообразие полиморфных модификаций и вариантов атомно-вакансионного упорядочения в монооксиде титана: дальний, ближний порядок и структурная наследственность

Костенко М. Г.<sup>\*1</sup>, Рыльцев Р. Е.<sup>2</sup>, Щелкачев Н. М.<sup>3</sup>, Ремпель А. А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, 17, <sup>2</sup>ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург, <sup>3</sup>ИТФ РАН, Москва,

\*makskostenko@yandex.ru

Монооксид титана  $\text{TiO}_y$  с базисной кристаллической структурой  $B1$  обладает широкой областью гомогенности ( $0.80 < y < 1.25$ ). Сильная нестехиометрия обусловлена аномально высоким содержанием структурных вакансий – узлов кристаллической решетки, незанятых атомами. С вакансиями связаны эффекты атомно-вакансионного упорядочения, приводящие к образованию новых фаз. Для описания их структуры используется либо модель статистического распределения вакансий (неупорядоченная фаза  $\gamma\text{-TiO}$  [1, 2]), либо модель идеально упорядоченных сверхструктур (фазы  $\alpha\text{-TiO}$  [1, 2] и  $\beta\text{-TiO}$  [1, 3]). Указанные модели основаны на простейших приближениях и не дают исчерпывающей информации о реальной атомной структуре соединения.

В данной работе с использованием методов компьютерного моделирования, стандартных DFT-расчетов [4, 5], а также генетического алгоритма предсказания кристаллических структур [6] предложены реалистичные модели атомной структуры для известных фаз монооксида титана, а также проведен поиск его новых полиморфных модификаций.

1. Для неупорядоченной кубической фазы  $\gamma\text{-TiO}$  построены модели ближнего порядка, учитывающие энергетически выгодные атомно-вакансионные корреляции. Показано, что неупорядоченная фаза наследует локальные корреляции, характерные для упорядоченной фазы  $\alpha\text{-TiO}$  с моноклинной сверхструктурой  $M_5X_5$  (пр. гр.  $C2/m$ ).

2. Для упорядоченной фазы  $\alpha\text{-TiO}$  построены модели частичного разупорядочения, учитывающие одновременно дальний порядок и энергетически выгодный ближний порядок, который моделируется повышением доли наследуемых атомно-вакансионных группировок в разупорядочивающейся структуре.

3. Для высокотемпературной упорядоченной фазы  $\beta\text{-TiO}$  предложены суперпозиционные модели упорядочения, при которых в матрице базисной структуры  $B1$  совмещены две частично упорядоченные сверхструктуры типа  $M_5X_5$ .

4. Рассмотрены модели переходных состояний порядок-беспорядок с разупорядочением в отдельных дефектных плоскостях базисной структуры, характерные для нанокристаллического состояния.

5. Проведен поиск альтернативных полиморфных модификаций идеально упорядоченных фаз и рассчитана фазовая диаграмма в переменных температура-давление. При нормальных условиях термодинамически равновесна фаза  $\epsilon\text{-TiO}$  с гексагональной структурой типа  $\epsilon\text{-TiN}$ , не содержащей структурные вакансии. Фазы с производной от  $B1$  структурой равновесны при температурах выше 1290 К.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проектов РФФИ № 17-02-00037 (моделирование переходных структур, суперпозиционные модели) и РНФ № 18-12-00438 (оценка фазовой диаграммы, анализ структурной наследственности) с использованием оборудования центра коллективного пользования «Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса» НИЦ «Курчатовский институт», <http://sckr.nrcki.ru/>, суперкомпьютеров «Уран» ИММ УрО РАН и МСЦ РАН.

1. Murray J. L., Wriedt H. A. // Bull. Alloy Phase Diagr. 1987. V.8. P.148.
2. Watanabe D., Castles J. R., Jostsons A., Malin A. S. // Nature. 1966. V.210. P.934.
3. Gusev A. I. // J. Sol. State Chem. 2013. V.199. P.181.
4. Giannozzi P. et al. // J. Phys. Cond. Matter. 2009. V.21. P.395502.
5. Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. 1996. V.54. P.11169.
6. Oganov A. R., Glass C. W. // J. Chem. Phys. 2006. V.124. P.244704.

### Фазовая диаграмма двумерной системы сфер Герца.

Фомин Ю.Д.<sup>\*</sup>, Гайдук Е.А., Циок Е.Н., Рыжов В.Н.

ИФВД РАН, Троицк,

\*fomin314@mail.ru

Известно, что плавление двумерных систем является гораздо более сложной задачей, чем в случае трех измерений. Если трехмерные кристаллы плавятся исключительно посредством перехода первого рода, то в двумерном случае известно три различных сценария плавления (см. обзор [1] и ссылки в этом обзоре). Поэтому изучение плавления двумерных систем является чрезвычайно запутанной задачей, требующей тщательного рассмотрения.

В настоящей работе мы изучаем фазовую диаграмму чисто отталкивательной системы частиц, взаимодействующих посредством потенциала Герца [2]. Этот потенциал описывает упругие взаимодействия деформированных шаров [3] и может применяться для описания поведения «мягких» макромолекул, например, полимерных глобул. В работе показано, что в двумерной системе сфер Герца наблюдается большое количество упорядоченных фаз, включая додекагональный квазикристалл, и проанализированы сценарии плавления треугольного и квадратного кристаллов сфер Герца. Чрезвычайно важным является тот факт, что в изучаемой системе обнаружены все три возможных сценария плавления. На сегодняшний день это единственная двумерная система, демонстрирующая такое разнообразие сценариев. Кроме того, было показано, что при плавлении треугольной фазы наблюдаются разные сценарии плавления при высоких и низких температурах. Переход между сценариями происходит через трикритическую точку, в которой непрерывный переход из гексагональной фазы в изотропную жидкость трансформируется в переход первого рода между этими фазами. Работа опубликована в статье [4]. Работа поддержана грантом РНФ № 14-22-00093.

1. В. Н. Рыжов, Е.Е. Тареева, Ю.Д. Фомин, Е.Н. Циок, УФН 187, 921 (2017)
2. J. C. Pàmies, A. Sacchiuto, and D. Frenkel, J. Chem. Phys. 131, 044514 (2009)
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц “Теория упругости”, Москва, «Наука», 1987
4. Yu. D. Fomin, E. A. Gaiduk, E. N. Tsiok, and V. N. Ryzhov, Molecular Physics, doi.org/10.1080/00268976.2018.1464676

## Молекулярно-динамическое моделирование эффекта дальнего действия в металлах при облучении нанокластерами

Шарипов З.А.<sup>\*1</sup>, Батгэрэл Б.<sup>2</sup>, Димова С.Н.<sup>3</sup>, Пузынин И.В.<sup>1</sup>, Пузынина Т.П.<sup>1</sup>, Тузлеев З.К.<sup>1</sup>, Христов И.Г.<sup>3</sup>, Христова Р.Д.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ОИЯИ, Дубна, , <sup>2</sup>МУНУТ, Улан-Батор, 13, <sup>3</sup>СУ, София, 21

\*zarif@jinr.ru

При облучении нанокластерами металлической мишени в малом объеме взаимодействия происходит выделение большого количества энергии, что приводит к структурным изменениям в металле. Источником структурных изменений могут быть тепловые процессы или упругие взаимодействия (расталкивание атомов мишени). Экспериментальные исследования фиксируют конечные результаты этих структурных изменений в мишени. Применение молекулярно-динамического моделирования позволяет проследить динамику процесса облучения, включая тепловые и структурные изменения, и является важным инструментом теоретического изучения процессов облучения мишеней нанокластерами [1]. В данной работе моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS [2], установленного на вычислительном кластере HybriLIT [3].

В работе [4] авторами был обнаружен эффект волнового переноса тепла при моделировании термических процессов в металлах, облучаемых нанокластерами меди с энергией в диапазоне 10-50 эв/атом. Настоящая работа отличается от предыдущих работ тем, что металлическая мишень облучается не одним, а несколькими (от двух до четырех) нанокластерами одновременно, области взаимодействия которых находятся друг от друга на определенном расстоянии. Так как волновой перенос тепла распространяется по диагонали, это приводит к тому, что в глубине мишени происходит слияние движущихся областей с высокой температурой. Температура в области слияния резко возрастает, превышая температуру плавления мишени, что может привести к структурным изменениям мишени. Численно определено, что эта область находится на глубине, превышающей глубину проникновения кластера. Этот результат может быть применен для объяснения эффекта дальнего действия [5].

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

1. Холмуродов Х.Т., Алтайский М.В., Пузынин И.В. и др. //ЭЧАЯ. 2003. Т. 34. Вып. 2. С. 472.
2. Plimpton S. // J. Comp. Phys. 117. 1-19 (1995)
3. <http://hybrilit.jinr.ru/>
4. В. Batgerel, S. Dimova, I. Puzynin et al. //EPJ Web Conf., 173 (2018) 06001.
5. Н.П. Опарина, М.И. Гусева и др. //ВАНТ. Серия: Термоядерный синтез. 2007, вып.3, С.18-27.

**Оценка энтропии в молекулярно-динамическом моделировании на основе двухфазной модели с потенциалом мягких сфер**

*Барсукова А.А.\* , Левашов П.Р., Минаков Д.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*anastasiya.barsukova@phystech.edu*

Модельные потенциалы мягких и твердых сфер широко используются для описания свойств различных систем. В частности, потенциал твердых сфер применяется для построения теории возмущений в простых жидкостях [1], а также для приближенного вычисления энтропии в молекулярно-динамических расчетах [2]. В данной работе для вычисления энтропии предлагается вместо потенциала твердых сфер использовать потенциал мягких сфер [3]. Известно [4], что термодинамические свойства системы, атомы которой взаимодействуют с потенциалом мягких сфер, обладают свойством автомодельности, что можно использовать для отыскания удобных аппроксимаций. В работе будут представлены результаты молекулярно-динамического моделирования термодинамических свойств, коэффициента самодиффузии и автокорреляционной функции скорости для газа мягких сфер. Будут обсуждаться различные автомодельные зависимости этих свойств для различных приложений. Кроме того, на примере рения будут представлены результаты вычисления энтропии тугоплавких металлов, находящихся в жидкой фазе.

1. Kang H.S., Lee C.S., Ree T., Ree F.H. A perturbation theory of classical equilibrium fluids // J. Chem. Phys. 1985. V.82. P.414-423.
2. Lin S.-T., Blanco M., Goddard W.A. III. The two-phase model for calculating thermodynamic properties of liquids from molecular dynamics: Validation for the phase diagram of Lennard-Jones fluids // J. Chem. Phys. 2003. V.119. P.11792.
3. Hoover W.G., Marvin R., Johnson K.W., Henderson D., Barker J.A., et al. Soft Sphere Equation of State. // J. Chem. Phys. 1970 V. 52, No.10. P.4931-4934.
4. Hoover W.G., Stell G., Goldmark E., Degani G.D. Generalized van der Waals equation of state. // J. Chem. Phys. 1975. V. 63. No.12. P. 5434-5438.

**Расчет сдвиговой вязкости жидких углеводородов с помощью методов молекулярной динамики**

*Кондратьюк Н.Д.\* , Писарев В.В.*

*НИУ ВШЭ, Москва,*

*\*kondratyuk@phystech.edu*

Современная индустрия проявляет большой интерес к исследованию свойств жидких углеводородов, так как они входят в состав смазочных, изоляционных и топливных смесей. Одними из определяющих характеристик являются транспортные коэффициенты (диффузия, вязкость и теплопроводность).

Проведенные расчеты вязкости жидких углеводородов продемонстрировали возможность применимости метода Грина-Кубо [1] в случае однокомпонентных систем. Полученные значения коэффициентов вязкости для исследуемых углеводородов совпадают с экспериментальными данными в пределах 10%. Экспериментальная зависимость вязкости от температуры воспроизводится с помощью используемых методов.

Проведен анализ вкладов различных компонент тензора напряжений в интеграл вязкости. Предложен подход для удобного представления данных в виде таблиц. Показано, что вклады отдельных компонент могут на порядок превосходить итоговое значение интеграла. Также получено, что времена корреляции растут с увеличением количества атомов в молекуле углеводорода.

Выполнено сравнение результатов, полученных методом Грина-Кубо, с результатами из неравновесной молекулярной динамики [2]. Значения совпадают в пределах вычислительной погрешности для всего ряда исследуемых n-алканов при различных температурах и давлениях.

В работе выполнено сравнение трех потенциалов взаимодействия: TraPPE-EH, OPLS-AA и COMPASS, который в отличие от TraPPE-EH и OPLS-AA учитывает ангармонизм связей и углов. В случае вязкости, все три потенциала дают схожие результаты.

Доклад подготовлен в ходе 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».

1. Zhang Y., Otani A., Maginn E. J. // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. No. 8. P. 3537.
2. Bordat P., Müller-Plathe F. // J. Chem. Phys. 2002. V. 116. No. 8. P. 3362.

## Коэффициенты термической аккомодации и теплоотдачи для наночастиц Fe в атмосфере Ar

Ленёв Д.Ю.<sup>\*1</sup>, Норман Г.Э.<sup>2</sup>

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

\*lenevdy@mail.ru

Работа посвящена расчетам коэффициента термической аккомодации и коэффициента теплоотдачи для железного кластера, который обстреливается единичными атомами аргона.

Коэффициент термической аккомодации рассчитывается по формуле:

$$\beta = m \langle v_f^2 - v_i^2 \rangle / (4k_B(T - T_a))$$

где  $m$  – масса налетающего атома,  $v_f$  и  $v_i$  – скорости налетающего атома после и до соударения с кластером,  $k_B$  – константа Больцмана,  $T$  и  $T_a$  – температуры кластера и потока налетающих атомов. Усреднение количества полученной атомом энергии показано скобками  $\langle \rangle$ .

Для коэффициента термической аккомодации получены температурные зависимости и зависимости от числа атомов в кластере. Коэффициент термической аккомодации убывает с ростом температуры. Зависимость оказалась линейной в логарифмическом масштабе от обратной температуры. Полученные результаты были сопоставлены с экспериментом и другим численным расчетом. Для этого проведена экстраполяция зависимости от размера кластера на большие размеры кластера вплоть до бесконечных. В численном эксперименте [1] получено значение  $0.23 \pm 0.03$  для плоской поверхности, тогда как в данной работе  $0.21 \pm 0.06$ . Экспериментально полученное [2] значение равняется 0.1. Поскольку там не была оценена погрешность, можно считать сходство удовлетворительным.

Для расчёта коэффициента теплоотдачи использовалась следующая формула:

$$k = Q\nu / (T - T_a)S = \beta\nu / S$$

где  $\nu$  – частота соударений,  $S$  – площадь поверхности кластера. Зависимость коэффициента теплоотдачи от температуры полностью определяется коэффициентом термической аккомодации. Зависимость от размера кластера оказалась возрастающей, также, как и в экспериментах. Абсолютная величина для железа не была измерена, однако, полученная на порядок превосходит таковую для раствора карбида кремния [3] и на полтора порядка – раствор оксида меди [4]. Предположительная причина расхождения в том, что в эксперименте были рассмотрены растворы, в расчете – чистое вещество.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-79-20391).

1. Daun K., Sipkens T.A., Titantah J.T., Karttunen M. Thermal Accommodation Coefficients for Laser-Induced Incandescence Sizing of Metal Nanoparticles in Monatomic Gases // *Appl.Phys. B*. 2013. V. 8. P. 409.
2. Eremin A.V., Gurentsov E.V., Priemchenko K.Yu. Iron nanoparticle growth induced by Kr-F excimer laser photolysis of Fe(CO)<sub>5</sub> // *J. of Nanoparticle Research*. 2013. V. 15 P. 1537
3. Timofeeva E.V., Smith D.S., Yu W., France D.M., Singh D., Routbo J.L. Particle Size and Interfacial Effects on Thermophysical and Heat Transfer Characteristics of Water-Based  $\alpha$ -SiC Nanofluids // *Nanotechnology*. 2010. V. 21. P. 215 703
4. Минаков А.В., Рудяк В.Я., Гузей Д.В., Лобасов А.С. Измерение коэффициента теплоотдачи наножидкости на основе воды и частиц оксида меди // *ТВТ*. 2015. Т. 53. № 2. С. 256.

## Эффективные методы расчета коэффициентов диффузии в растворах

Орехов М.А.

НИУ ВШЭ, Москва,

mo2411@mail.ru

Обнаружено, что зависимость коэффициента диффузии иона от его радиуса имеет множественные максимумы. Данный эффект получен из прямых расчетов методом молекулярной динамики коэффициента диффузии ионов в воде и жидком ксеноне. Данный эффект связан с увеличением коэффициента диффузии при изменении координационного числа иона с ростом его радиуса. При радиусах иона, отвечающих дробным значениям координационного числа, возникают флуктуации сольватной оболочки иона, приводящие к росту коэффициента диффузии. При целом значении координационного числа иона сольватная оболочка становится более устойчива и коэффициент диффузии иона уменьшается.

Показано, что для оценки изменения коэффициента диффузии иона с ростом его радиуса можно использовать значение координационного числа иона. Коэффициент диффузии иона с большим количеством допустимых координационных чисел больше, чем коэффициент диффузии иона с одним значением координационного числа.

Показано, что дисперсия расчетного значения коэффициента диффузии уменьшается при уменьшении размера расчетной ячейки, при одном и том же количестве статистики. Количество статистики определяется произведением числа ионов, по которым ведется усреднение ( $N_{ion}$ ) на время расчета  $t_{calc}$ :  $N_{ion} \times t_{calc} = const$ .

Таким образом, для получения наиболее статистически точного результата целесообразно проводить расчеты коэффициента диффузии в системе с минимальным числом частиц. Далее результаты расчетов необходимо подвергнуть размерной коррекции.

Доклад подготовлен в ходе 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».

## Молекулярно-динамическое моделирование коэффициентов переноса газов и жидкостей

*Рудяк В.Я.*

*НГАСУ, Новосибирск,*

*valery.rudyak@mail.ru*

Молекулярная или атомная структура всего окружающего нас требует, вообще говоря, и соответствующего описания: микроскопического. Однако на практике обычно вполне достаточно информации о некоторых интегральных макроскопических характеристиках исследуемой системы. Ее динамика при этом также строится на макроскопическом уровне описания, которое формулируется феноменологически. Недостаточность такого подхода хорошо известна. Получаемые феноменологически уравнения переноса не замкнуты и содержат феноменологически не определяемые величины. В динамике газов, жидкостей и дисперсных жидкостей это коэффициенты переноса: уравнение состояния, коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности и т.д.

Фактически единственным методом получения адекватной информации о коэффициентах переноса, помимо, естественно, эксперимента, является молекулярное моделирование. И наиболее последовательным методом такого моделирования является метод молекулярной динамики. Данный доклад и посвящен описанию моделирования коэффициентов переноса в различных системах методом молекулярной динамики. Здесь прежде всего, из первых принципов выводятся обобщенные уравнения переноса. Показано, в каких случаях и для каких сред эти уравнения сводятся к традиционно используемым в физике и механике сплошных сред уравнениям переноса. Для этого случая формулируется полный набор флуктуационно-диссипационных теорем, устанавливающих связь коэффициентов переноса с микрофлуктуациями соответствующих динамических переменных рассматриваемой системы. Показано, что существование и измеримость коэффициентов переноса требует наличия так называемых платовых значений их эволюции, на которых соответствующие корреляционные функции затухают.

Затем систематически анализируется моделирование коэффициентов переноса, отдельно рассматриваются так называемые равновесная и неравновесная молекулярная динамика. Устанавливается взаимосвязь этих методов и показано, в каких случаях они будут приводить к одинаковым результатам, и когда метод равновесной молекулярной динамики не применим. Применимость метода продемонстрирована на примере расчета различных систем, в том числе таких сложных, как вода или наножидкость. С другой стороны, показано, какую в принципе информацию может дать использование неравновесной молекулярной динамики.

Процессы переноса газов и жидкостей в стесненных условиях (в наноканалах, нанопорах и т.п.) существенно отличаются от соответствующих процессов в объеме из-за интенсивного взаимодействия молекул флюида с молекулами (атомами) стенок. Показано, как в этом случае трансформируются флуктуационно-диссипационные теоремы. Приведены примеры расчета коэффициента вязкости жидкости в плоском наноканале. Одновременно установлены границы применимости обычно используемых предположений об изотропности и однородности процессов переноса.

В заключительной части работы анализируются процессы переноса в сильно неравновесных течениях, когда используются те или иные нелинейные законы переноса. Обсуждается адекватность обычно формулируемых феноменологически уравнений динамики флюида с нелинейными законами переноса.

Работа частично финансируется РФФИ (гранты № 17-01-00040 и № 17-58-45023) и гранта РНФ (проект № 17-79-20218).

**Пути переноса энергии между хромофорами фотоантенны ЛНСП**

*Козлов М.И.\* , Поддубный В.В.*

*МГУ, Москва,*

*\*mikozlov94@gmail.com*

Комплекс ЛНСП является основной фотосинтетической антенной растений, роль которой заключается в поглощении света и передаче его энергии на фотосистемы, преобразующие её в химическую. Ключевую роль в первых двух процессах играют молекулы хромофоров, входящие в состав ЛНСП: хлорофиллы *a, b* и каротиноиды. Основную роль в процессе передачи энергии на фотосистемы играют молекулы хлорофиллов, поскольку после фотовозбуждения каротиноидов энергия с них передается на хлорофиллы. Однако, возможен и обратный перенос, при котором каротиноиды переходят в свое первое возбужденное электронное состояние, которое не проявляется в оптических спектрах. Такой перенос энергии является первой стадией одного из механизмов процесса нефотохимического тушения флуоресценции, с помощью которого комплексы избегают фотоповреждения при высоких интенсивностях света [1].

В данной работе мы провели неэмпирическое моделирование свойств возбужденных состояний субъединицы комплекса ЛНСП в водном растворе. Моделирование проводилось с помощью метода экситонных гамильтонианов на основе квантовохимических расчетов для отдельных молекул хромофоров с учетом их окружения. На основе проведенных расчетов были определены наиболее вероятные пути переноса энергии между молекулами хромофоров.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-33-01122 )

1. Goss R., Lepetit B. // Journal of Plant Physiology. 2015. V. 172. P. 13–32.

**Структурно-динамические характеристики белок-липидных взаимодействий в модельных биомембранах**

*Кузнецов А.С.\* , Ефремов Р.Г.*

*НИУ ВШЭ, Москва,*

*\*akuzneczov@hse.ru*

Биологические мембраны — сложные многокомпонентные системы, выполняющие ряд жизненно важных функций. Структурной основой биомембраны является липидный бислой, обеспечивающий барьерную функцию. Также ключевыми являются процессы транспорта веществ и клеточного сигналинга. В последнем принимают участие рецепторы — мембранные белки, обладающие рядом ключевых особенностей. Все они содержат в своём составе внеклеточные лиганд-связывающие, цитоплазматические и трансмембранные (т. е. пересекающие мембрану) альфа-спиральные домены. При этом последние взаимодействуют с липидным окружением и принимают непосредственное участие в передаче сигнала извне внутрь клетки. В основе данного процесса лежит конформационная перестройка трансмембранных доменов. В простейшем случае (у рецепторных тирозинкиназ и ряда других белков) трансмембранный домен представлен одной спиралью, а функционально активной единицей является комплекс из двух белков, т. е. димер. Димеризация таких рецепторных белков происходит в том числе и в области их трансмембранных доменов, причём в этом процессе участвует их липидное окружение. В настоящей работе рассматривается вопрос взаимного влияния трансмембранных доменов белков (или имитирующих их пептидных фрагментов) и окружающих их молекул липидов. В качестве объектов исследования выбрали белки из семейства рецепторов эпидермального фактора роста, а также гликофорин А и модельные пептиды. Получены траектории молекулярной динамики модельных биомембран, включающих мономеры и димеры белков и проведён анализ липидного окружения. Выявлена кластеризация липидных молекул вблизи области взаимодействия мономеров, наиболее ярко проявляющаяся в гидрофобной области липидного бислоя.

**Структурно-динамическая модель комплекса укороченного аналога низина с фрагментом липида II**

*Свидерская К.С.\*<sup>1</sup>, Панина И.С.<sup>2</sup>, Ефремов Р.Г.<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>НИУ ВШЭ, <sup>2</sup>ИБХ РАН, 17, Москва*

*\*sviderskayaks@gmail.com*

В процессе обновления клеточной стенки бактерий участвует молекула липид II. Целенаправленно заблокировав работу этой молекулы, можно нарушить синтез клеточной стенки, лишив бактерию шансов на выживание.

Существуют несколько классов природных соединений, действующих на липид II. Низин — первый открытый и наиболее изученный представитель семейства антимикробных пептидов — лантибиотиков. Он состоит из 34 аминокислотных остатков и включает 5 лантиониновых колец. В структуре его комплекса с липидом II, полученной методом спектроскопии ЯМР в диметилсульфоксиде (ДМСО), узвание липида II низином происходит в области пиррофосфата, причем связывание наблюдается на участке первых двух колецх низина [1]. На сегодняшний день структура комплекса в естественной среде, т.е. на поверхности мембраны, не установлена. Её предсказание с помощью компьютерного моделирования является важным шагом к пониманию молекулярных механизмов действия лантибиотиков на их мишени в бактериальной мембране.

Моделирование в воде упрощенной системы — первых двух колец низина с диметилпиррофосфатом, имитирующим сайт связывания липида II, — выявило конформацию лантибиотика, в которой образуется наиболее стабильный комплекс, где второе кольцо максимально сближается с первым и стабилизирует в нем сонаправленное расположение N-H групп основной цепи — доноров водородных связей (т.н. конформация «ловушки») [2].

В настоящей работе методом молекулярной динамики проведено исследование системы, приближенной к реальным условиям — трех колец низина с диметилпиррофосфатом в водном растворе. С целью сравнения полученных

результатов с экспериментальными данными проведена серия аналогичных экспериментов в растворе ДМСО. Показано, что структура комплекса определяется выбором растворителя: спонтанное образование конформации «ловушки» наблюдается только в водном растворе, тогда как в ДМСО наблюдали структуру, схожую с полученной методом спектроскопии ЯМР.

И в воде, и в ДМСО были обнаружены два сайта связывания: на N конце или кольце A низина и на кольце C. Наличие третьего кольца не повлияло на возникновение первого сайта связывания, полученного и в предыдущих исследованиях.

Кроме того, изучали конформационные возможности пиррофосфата в растворе и в комплексе с низином. Анализ значений псевдодвугранных углов O-P-P-O, которые характеризуют взаимное пространственное расположение «головки» и «хвоста» молекулы липида-II, показывает, что при связывании пиррофосфатной группы предпочтительное значение угла составляет  $-60^\circ$ . При этом не связанные с низином молекулы диметилпиррофосфата способны свободно вращаться как в воде, так и в ДМСО.

1. Hsu S.-T.D., Breukink E., Tishenko E., Lutters M.A.G., de Kruijff B., Kaptein R., Bonvin A.M.J.J., van Nuland N.A.J. // *Nat. Struct. Mol. Biol.* 2004. 11, 963-967.
2. Панина И.С., Нольде Д.Е., Чугунов А.О., Ефремов Р.Г. // *Молекулярная биофизика и физика биомолекул.* 2016. С. 263-267.

#### **Атомистическое моделирование поведения молекул воды в ионном канале TRPV1**

***Трофимов Ю.А.\**, Крылов Н.А., Ефремов Р.Г.**

*НИУ ВШЭ, Москва,*

*\*YuTrofimov@gmail.com*

Ионный канал TRPV1 – представитель обширного класса белковых молекул, образующих поры в клеточной мембране и обеспечивающих проведение через неё ионов и молекул воды в ответ на разнообразные физические и химические стимулы. Пора канала TRPV1 представляет из себя доступный молекулам воды объем нанометрового масштаба, образованный как полярными, так и неполярными группами аминокислотных остатков белка. Поведение воды в подобном окружении значительно отличается от динамики молекул “свободной” воды, и атомистические аспекты этих явлений мало изучены. Поскольку взаимодействие канала с водой может влиять на его функционирование, данный вопрос требует внимательного рассмотрения, в т.ч. с помощью компьютерного моделирования.

В работе проанализированы результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования помещенного в гидратированный липидный бислой канала TRPV1 в открытом и закрытом состояниях [1]. Показано, что пространственное распределение воды в канале имеет крайне неоднородный характер: вблизи некоторых полярных групп TRPV1 присутствуют компактные области высокой плотности воды, возникновение которых объясняется формированием водородных связей белок-вода. Среднее время жизни таких связей, в зависимости от доступности воде конкретных полярных групп, изменяется в диапазоне от 15-20 пс до 1 нс, при этом суммарная длительность гидратации этих групп достигает 70-100% времени МД. В частности, в случае открытого канала цепочка близко расположенных областей высокой плотности воды может формироваться в створе т.н. “нижних ворот”, приводя к их длительной (80-100% времени МД) гидратации, тем самым препятствуя возникновению эффекта “гидрофобного гейтинга” и облегчая прохождение через канал молекул воды и ионов. Предложен возможный механизм гидратации ворот, обусловленный пространственной ориентацией полярных групп аминокислотных остатков Asn676 и положением гидрофобных боковых цепей остатков Pе679.

Работа подготовлена в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ и с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов РФ “5-100”.

1. Chugunov, A. O. et al. // *Scientific Rep.* 2016. V.6 No 33112. P.1-16.

**Плазменный фазовый переход (к 50-летию предсказания)**

*Норман Г.Э.<sup>\*1</sup>, Сайтов И.М.<sup>2</sup>*

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

\*genri.norman@gmail.com

Плазменный фазовый переход предсказан [1] в 1968 г. по аналогии с уравнением Ван-дер-Ваальса. Дальнейшим притяжением служило эффективное кулоновское взаимодействие в поляризованной системе зарядов, а короткодействующее отталкивание обеспечивалось квантовыми эффектами на малых расстояниях. Во-вторых, для изотерм зависимостей давления  $P$  от удельного объема были предсказаны [2] перекрытия по плотности равновесной ветви одной фазы с метастабильной ветвью другой фазы как с одной, так и с другой стороны фазового перехода. Такие перекрытия отсутствуют в уравнении Ван-дер-Ваальса. Третьим предсказанием [3, 4] было указание на то, что кривая равновесия фаз  $P(T)$  заканчивается критической точкой при высоких температурах  $T$  и может иметь тройную точку на кривой плавления при низких  $T$  [5].

Оценки [1-4] делались в рамках химической модели, в которой использовалось уравнение ионизационного равновесия с поправкой на неидеальность системы свободных зарядов в рамках известных тогда вириального и квазикристаллического приближений. В течение последующих десятилетий этот подход развивался: с одной стороны, в химическую модель включались новые компоненты, помимо электронов и ионов, с учётом взаимодействий между всеми компонентами, с другой стороны, уточнялся характер учёта этих взаимодействий. См., например, [6,7]. Последняя версия химической модели представлена в [8]. Предсказания [1-4] остались в силе.

Первые экспериментальные результаты, которые можно было бы интерпретировать как экспериментальное обнаружение плазменного фазового перехода, появились только в последнее десятилетие (см. ссылки в [7]). Измерения проводились на разогретом плотном водороде как в ударных волнах, так и алмазных наковальнях. К этому же времени в теории стали применяться методы, основанные на теории функционала плотности.

Свойства разогретого плотного водорода исследовались методами *ab initio* молекулярной динамики с использованием теории функционала плотности и квантового Монте-Карло. Фазовый переход первого рода был обнаружен, кривая сосуществования оказалась близкой к измеренной. Относительно природы перехода мнения расходятся [9]: под гипнозом известной работы Вигнера и Хантингтона 1935 года пытаются связать с металлизацией водорода, альтернативой является диссоциация давлением  $H_2 \rightarrow 2H$ , упомянут и плазменный фазовый переход.

В [7] вводится идея, что при фазовом переходе флюид-флюид в разогретом плотном водороде/дейтерии происходит ионизация молекул  $H_2$  с образованием молекулярных ионов  $H_2^+$  и  $H_3^+$ . Предложен двухступенчатый механизм перехода. Происходит плазменный фазовый переход с частичной ионизацией молекул  $H_2$  и образованием ионов  $H_2^+$ . Затем образуются ионы  $H_3^+$  в результате реакции молекул  $H_2$  с ионами  $H_2^+$ . Природа перехода сочетает ионизацию со структурными изменениями. Сильная ионизация при фазовом переходе флюид-флюид в разогретом плотном водороде сближает этот переход с предсказанием плазменного фазового перехода.

Как в теории, так и в экспериментах наблюдавшийся скачок плотности был достаточно мал, что, возможно, затрудняло его обнаружение в некоторых работах. Поэтому требуются дополнительные методы диагностики, в частности, по метастабильным состояниям, существование которых служит критерием того, что этот фазовый переход именно первого рода. Был разработан и применен метод получения метастабильных состояний [10]. Размер метастабильных областей по плотностям для температур 700 и 1000 К оказался в несколько раз больше самого скачка плотности при фазовом переходе. Обсуждается существование критической и тройной точек.

Предсказания [1-4] выполнены. В докладе рассмотрен новый уровень результатов.

Доклад подготовлен в ходе 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".

1. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ, 6, 410, 1968
2. Л. М. Биберман, Г. Э. Норман, ТВТ, 7, 822, 1969
3. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, ТВТ, 8, 413, 1970
4. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин, Ж. приклад. спектр., 13, 149, 1970
5. В.В. Бражкин, Р.Н. Волошин, С.В. Попова, Письма ЖЭТФ 50, 92, 1989
6. W. Ebeling, G. Norman, J. Stat. Phys., 110, 861, 2003
7. G. E. Norman, I. M. Saitov. Contrib. Plasma Phys., 58, 122, 2018
8. А. Н. Старостин, В. К. Грязнов, А. В. Филиппов, Письма в ЖЭТФ, 107, 23, 2018
9. J. M. McMahon et al, Rev. Mod. Phys., 84, 1607, 2012
10. Г. Э. Норман, И.М. Сайтов, Р.А. Сарган. ДАН 481, No. 4, 2018

## Метаустабильные состояния разогретого плотного водорода

*Сартан Р.А.<sup>\*1</sup>, Норман Г.Э.<sup>2</sup>, Саитов И.М.<sup>1</sup>*

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

\*r.sartan@gmail.com

В данной работе метастабильные состояния разогретого плотного водорода, сопутствующие фазовому переходу флюид-флюид, исследованы методами квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности. Разработан способ моделирования метастабильных состояний. Рассчитаны изотермы 700, 1000, 1500 и 2000 К. Диагностика метастабильности проводилась по уравнению состояний, парным корреляционным функциям и значениям электрической проводимости.

Для 700 и 1000 К получены метастабильные состояния молекулярной диэлектрической фазы. Парные корреляционные функции сохраняют свою форму вдоль метастабильных ветвей, что подтверждает сохранение молекулярной фазы. Значения проводимости так же диагностируют сохранение диэлектрической фазы.

Существование метастабильных состояний указывает на фазовый переход именно первого рода.

Внешний вид изотерм значительно отличается от Ван-дер-Ваальсовых относительно малым скачком плотности и большим перекрытием равновесной и метастабильной ветвей. Причем равновесные и метастабильные ветви различных изотерм лежат вдоль одних кривых для каждой из фаз.

Работа выполнена в рамках гранта РФ № 18-19-00734.

## Фазовые переходы в плотной плазме водорода при давлениях мегабарного диапазона

*Старостин А.Н.<sup>1</sup>, Грязнов В.К.<sup>2</sup>, Филлипов А.В.<sup>\*1</sup>*

<sup>1</sup>ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, <sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черногловка,

\*fav@triniti.ru

Настоящая работа посвящена исследованию плазменных фазовых переходов в плотной неидеальной плазме водорода (дейтерия). Для получения термодинамических параметров, включая компонентный состав, в настоящей работе использовался квазихимический подход [1,2], основанный на методе минимизации свободной энергии неидеальной многокомпонентной плазмы. Термодинамическая модель учитывала различные типы межчастичного взаимодействия, включая кулоновское взаимодействие заряженных частиц [2-4], короткодействующее отталкивание частиц, обладающих внутренней структурой [2,4], и взаимодействие заряженных частиц с нейтральными атомами и молекулами [5].

Расчеты термодинамических свойств водорода вдоль изотерм показали, что существуют две области в зависимостях давления от обратной плотности, где плазма становится неустойчивой. Эти зависимости похожи на кривые Ван-дер-Ваальса в области фазового перехода газ-жидкость. При низких плотностях состав плазмы соответствует классическим представлениям и представляет собой атомно-молекулярную смесь с малой добавкой заряженных частиц, число которых определяется условием электронейтральности плазмы.

При увеличении плотности наблюдается немонотонность плотностей каждой из компонент, связанная с фазовыми переходами со скачкообразным изменением состава. Сначала заряженная компонента представляет собой смесь электронов и молекулярных ионов  $H_2^+$ , а затем в результате фазового перехода ионы  $H_2^+$  пропадают (как и молекулы  $H_2$ ) и заряженная компонента переходит в электрон-протонную смесь, а вся плазма становится атомно-ионно-электронной. Во всем диапазоне плотностей состав определяется условиями химического и ионизационного равновесия и электронейтральности (баланс химических потенциалов компонент), которые выполняются с высокой точностью.

1. W. Ebeling, Physica **43**, 293 (1969).
2. В.Е. Фортов, В.Я. Терновой, М.В. Жерноклетов и др., ЖЭТФ **124**, 288 (2003).
3. И.Л. Иосилевский, ТВТ **18**, 447 (1980).
4. V.K. Gryaznov, I.L. Iosilevskiy, Contrib. Plasma Phys. **56**, 352 (2016).
5. Б.А. Тиман, ЖЭТФ **25** 733 (1953); В.А. Алексеев, А.А. Веденов, УФН **102**, 665 (1970).

## Применение ab initio метода волновых пакетов к моделированию плазменного фазового перехода плотного водорода

*Федоров И.Д.<sup>\*1</sup>, Орехов Н.Д.<sup>2</sup>, Стегайлов В.В.<sup>1</sup>*

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

\*ilya.d.fedorov@phystech.edu

Несмотря на то, что водород является одним из самых распространенных элементов во вселенной, его уравнение состояния при высоких давлениях до сих пор недостаточно хорошо исследовано. Один из нерешенных фундаментальных вопросов - природа перехода плотного молекулярного флюида водорода в горячую ионизированную фазу [1,2] при давлении в несколько сотен ГПа. В соответствующей области температур и давлений предполагается существование фазового перехода. Для исследования этой проблемы уже было проведено достаточно много экспериментов, которые, однако, до сих пор не привели к однозначному выводу о существовании перехода, его параметрах и природе [3,4].

Свойства плотного водорода интенсивно исследуются ab initio методами. Квантовый метод Монте-Карло дал несколько довольно точных результатов для плотной водородной плазмы. Ab initio молекулярная динамика (FPMD), основанная на теории функционала плотности при конечной температуре, является еще одним широко распространенным методом. Однако обе техники сталкиваются с методическими проблемами, когда необходимо выйти за границы борн-опенгеймеровского приближения. Сложность применения FPMD в условиях неравновесности была рассмотрена недавно [5]. В этой работе, мы используем метод волновых пакетов (WPMD) с потенциалом electron Force Field (eFF), как инструмент, способный учесть неадиабатические и неравновесные аспекты плазменного фазового перехода, а также дающий возможность изучить метастабильное состояние, относящееся

к этому переходу. В eFF протоны представлены как точечные частицы, в то время как волновая функция электронов представлена, как произведение Хартри одноэлектронных волновых функций, которые в свою очередь представляются функциями Гаусса с изменяющейся шириной. Вклад от запрета Паули приближается вкладом от введенной энергии Паули, делающей невыгодным нахождение электронов на одном уровне.

В данной работе был разработан метод анализа компонентного состава плазмы в модели eFF. Были получены результаты для изохорного нагрева для плотностей  $0.3-1 \text{ г/см}^3$ , которые показали отсутствие признаков скачкообразного изменения состава плазмы при переходе из молекулярной в атомарную фазу. Также зафиксировано существование перехода вибронной природы, соответствующего возбуждению электронов в молекулах  $\text{H}_2$ , температура перехода уменьшается при уменьшении скорости нагрева, но начинает слабо меняться при скоростях нагрева меньших  $0.1 \text{ К/фс}$ . Показано, что исследуемый переход обладает признаками фазового перехода первого рода: имеют место метастабильные состояния и гистерезис при нагреве и охлаждении, изотермы в P-V плоскости имеют две отдельные ветви.

1. Knudson M. D. et al. Direct observation of an abrupt insulator-to-metal transition in dense liquid deuterium //Science. – 2015. – Т. 348. – №. 6242. – С. 1455-1460.
2. Zaghoo M., Silvera I. F. Conductivity and dissociation in liquid metallic hydrogen and implications for planetary interiors //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2017. – С. 201707918.
3. Su J. T., Goddard III W. A. Excited electron dynamics modeling of warm dense matter //Physical review letters. – 2007. – Т. 99. – №. 18. – С. 185003.
4. Su J. T., Goddard III W. A. The dynamics of highly excited electronic systems: Applications of the electron force field //The Journal of chemical physics. – 2009. – Т. 131. – №. 24. – С. 244501.
5. Stegailov V. V., Zhilyaev P. A. Warm dense gold: effective ion-ion interaction and ionisation //Molecular Physics. – 2016. – Т. 114. – №. 3-4. – С. 509-518.

Структура и электронные свойства эндокомплексов гадолиния с фуллереном

Захарова А.В.<sup>\*1</sup>, Бедрина М.Е.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, , <sup>2</sup>СПбГУ, Санкт-Петербург, 17

\*zakharova.annet@gmail.com

Гадолиний, тяжелый радиоактивный металл из группы лантаноидов, обладает высокими парамагнитными свойствами, что обуславливает его использование в медицине в качестве контрастного агента. Для защиты организма от токсичного воздействия препаратов на основе гадолиния рассмотрена возможность его купирования в фуллеренах.

Проведено квантово-механическое моделирование методом DFT PBE0/SDD равновесной геометрии и электронной структуры эндокомплексов C<sub>60</sub>@Gd, C<sub>70</sub>@Gd и C<sub>84</sub>@Gd.

Показано, что гадолиний в полости фуллеренов образует химическую связь с атомами углерода, имеет положительный заряд и высокое значение спиновой плотности, которая частично перераспределяется на связанные с гадолинием атомы углерода.

Наименьшее расстояние гадолиний - углерод составляет 2.315Å для C<sub>60</sub>@Gd, 2.511Å для C<sub>70</sub>@Gd и 2.584Å для C<sub>84</sub>@Gd. Величина квадрата многоэлектронного спина для эндокомплексов сопоставима со значением для свободного атома гадолиния. Рассчитаны колебательные спектры и проведено сравнение энергетических характеристик эндокомплексов C<sub>60</sub>@Gd, C<sub>70</sub>@Gd, C<sub>84</sub>@Gd с результатами, полученными для фуллеренов C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>84</sub>.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 14-31-00022).

Кластерная модель кристалла ксенотима YPO<sub>4</sub>

Ломачук Ю.В.<sup>\*</sup>, Мальцев Д. А., Мосягин Н. С., Демидов Ю.А., Зайцевский А. В., Титов А. В.

НИЦ «Курчатовский Институт» - ПИЯФ, Гатчина, 17

\*jeral2007@gmail.com

Природные минералы, содержащие примеси радиоактивных элементов, можно рассматривать как естественные модели изолированных в матрицах высокоактивных отходов на разных стадиях радиационного разрушения. Поэтому исследование структуры и свойств таких материалов необходимо для создания новых форм керамических матриц. Кристаллы ксенотима и монацита являются основой широкого класса метамиктных соединений, в состав которых входят в примесных количествах радионуклиды U и Th [1].

Для надежного квантово-механического расчета состояний указанных примесей в кристаллах важно построение разных моделей кристалла, в первую очередь кластерных, которые могут быть верифицированы с применением самых точных квантовохимических методов. В настоящей работе на примере кристалла ксенотима YPO<sub>4</sub> показана возможность построения такой модели при наличии ковалентных связей в системе. Для этого было осуществлено разделение кластера на три 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 эффективных потенциалов остова для соответствующих атомов [2].
2. Область ближнего окружения. Атомы, входящие в эту область, моделируются с использованием дополнительных электростатических зарядов на ядрах, учитывающих их экранировку, и эффективных потенциалов остова с нулевым числом явно рассматриваемых электронов у этих атомов с учетом их степени окисления в кристалле.
3. Область дальнего окружения моделируется электростатическими зарядами на ядрах атомов.

Значения зарядов оптимизируются для достижения минимального значения суммы квадратов сил, действующих на атомы основной области кластера.

Для проверки построенной модели используется сопоставление с результатами расчетов для периодической структуры и экспериментальными данными. Использование разделения кластерной модели на три области позволяет добиться значения суммы квадратов сил, действующих на атомы из основной области кластера, менее чем 10<sup>-6</sup> ат. ед., при использовании положений ядер атомов, полученных из расчета периодической структуры кристалла, что соответствует смещениям атомов от оптимальных для кластерной модели порядка 0.01 Å.

Для построенной модели вычислены частоты собственных колебаний системы, проведено сопоставление с экспериментальными данными. Нужно отметить, что кластерные модели, подобные приведенной в работе, могут быть использованы не только для исследования электронной структуры соединений *d*- и *f*-элементов (либо их примесей) в кристаллах, но и для адсорбции атомов и молекул на поверхностях, а также для изучения пространственно-локализованных колебаний – «дискретных бризеров» [4] и других локализованных особенностей и свойств материалов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-31-00022). Расчеты проведены с использованием оборудования центра общего доступа ПИК НИЦ КИ ПИЯФ.

1. Nakai I., Akimoto J., Imafuku M. et al. // Phys. and Chem. of Minerals. 1987. V. 15. N. 2. P. 113-124.
2. Titov A. V., Mosyagin N. S. // Int. J. Quantum Chem. 1999. V. 71. N. 5. P. 359-401.
3. Mosyagin N. S., Zaitsevskii A. V., Skripnikov L. V., Titov A. V. // Int. J. Quantum Chem. 2016. V. 116. N. 4. P. 301-315.
4. Дмитриев С. В., Корзникова Е. А., Баимова Ю. А., Веларде М. Г. // УФН. 2016. Т. 186. С. 471-488

## Модель потенциала встраивания кластера в кристалл для ферсмита и её применение для расчёта свойств атомов-в-соединении на ниобии.

Мальцев Д. А.\* , Ломачук Ю.В., Скрипников Л.В., Демидов Ю.А., Мосягин Н.С.,  
Зайцевский А.В., Титов А.В.

НИИ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина,

\*danva.malcev@gmail.com

Использование потенциалов встраивания кластера в кристалл (ПВКК) позволяет проводить с высокой точностью расчёты свойств «атомов в соединении», таких как химические сдвиги (ХС) рентгеновских эмиссионных спектров (РЭС) в эффективном кристаллическом окружении. Использование метода ПВКК особенно актуально для изучения химического состояния (электронной конфигурации) примесных тяжёлых d- и f-элементов в кристаллах, для которых не существует надежных методов расчета, учитывающих периодическую структуру соединения. К числу таких кристаллов относятся танталониобаты, которые рассматриваются в литературе как природные «матрицы» для иммобилизации (захоронения) высокоактивных ядерных отходов, в первую очередь актинидов.

В докладе представлена модель ПВКК, основанная на замене граничных атомов кластера «псевдоатомами» с дробными зарядами и модифицированными («безэлектронными») псевдопотенциалами. Модель была применена для расчёта ХС РЭС на атоме ниобия в кристалле ферсмита (ниобата кальция).

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

1. Lomachuk, Y.V., Maltsev, D.A., Demidov, Y.A., Mosyagin, N.S., Batalov, L.A., Fomin, E., Bogdanov R.V., Zaitsevskii A.V., Titov, A.V. (2017). Calculations of chemical shifts of X-ray emission spectra and effective states of Nb atom in the niobates. *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, 20(2), 170-176.

## Механизм образования проводящей фазы твердого водорода при высоких давлениях

Норман Г.Э.<sup>1</sup>, Сaitов И.М.\*<sup>2</sup>

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

\*saitovilnur@gmail.com

Предположение о существовании металлического водорода выдвинуто Вигнером и Хантингтоном в 1935 г. Получена оценка давления металлизации при нулевой температуре в 25 ГПа. Тема продолжена многими теоретиками, которые увеличивали требуемое давление. В. Л. Гинзбург включил эту проблему в список особенно важных и интересных проблем физики. Развивались и экспериментальные исследования. 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. В докладе сделан 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.

В работе в рамках теории функционала плотности и квантовой молекулярной динамики рассчитаны зависимости давления, электропроводности и протон-протонных парных корреляционных функций (ПКФ) от плотности в диапазоне 1.14 – 2.0 г/см<sup>3</sup> при температурах 50 и 100 К. Рассчитанный диапазон давлений 300–1200 ГПа, т.е. твердая фаза. Расчеты проводятся с использованием пакета VASP. Для обменно-корреляционного взаимодействия используется приближение обобщенных градиентов с параметризацией в форме функционала PBE. В качестве начальной конфигурация 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 твердого водорода. Число протонов в элементарной ячейке 24.

Обнаружен структурный переход при давлении 607 ГПа, характеризующийся заметным скачком электропроводности и резким уменьшением числа молекул H<sub>2</sub>. При значении плотности 1.563 г/см<sup>3</sup> и давления 607 ГПа происходит исчезновение пика ПКФ на расстоянии 0.74 Å, соответствующем межатомному расстоянию в молекуле H<sub>2</sub>, что является указанием на распад молекул H<sub>2</sub>. При этом резко увеличивается значение электропроводности до 85300 (Ом·см)<sup>-1</sup> и возникает пик ПКФ на расстоянии 0.92 Å. Это расстояние равно межпротонному расстоянию в молекулярном ионе H<sub>3</sub><sup>+</sup>. Такое положение первого максимума ПКФ остается неизменным в диапазоне давлений 607 – 832 ГПа. Это говорит о неявном появлении ионов H<sub>3</sub><sup>+</sup> в структуре твердого водорода при его переходе в проводящее состояние. Таким образом, природа перехода сочетает ионизацию со структурными изменениями. При дальнейшем сжатии первый максимум ПКФ начинает соответствовать среднему расстоянию между протонами при заданной плотности, что указывает на полную диссоциацию ионов водорода. Сильная ионизация при фазовом переходе в плотном твердом водороде/дейтерии сближает этот переход с плазменным фазовым переходом во флюиде водорода.

Работа проведена при поддержке гранта РНФ 18-19-00734.

## Вычисление поправки Бора-Вайскопфа для атома таллия

*Просняк С. Д.\* , Скрипников Л. В.*

*НИИ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина,*

*\*prosnjak.sergey@yandex.ru*

Одной из прецизионно измеряемых величин в тяжёлых атомах (и малоатомных молекулах) является постоянная сверхтонкого расщепления. Для наиболее точного теоретического предсказания этого расщепления нужно учитывать поправки, несущие информацию о свойствах ядра. Первая из них, вызванная конечным распределением заряда ядра, получила название поправки Брейта-Розенталя, а вторая, связанная с распределением магнитного момента (т. е. отличия от модели точечного диполя) – поправки Бора-Вайскопфа. Подробному рассмотрению последней и была посвящена проведённая работа.

В качестве изучаемого объекта был выбран атом таллия. С одной стороны, для него уже были проведены достаточно точные расчёты, поэтому есть возможность сравнения, а с другой, применённые ранее техники расчёта не допускают прямого обобщения на случай молекул, а разработанный в данной работе подход может быть легко модифицирован для этой цели.

Атомно-молекулярные расчёты выполнены при поддержке гранта РФФИ (проект 14-31-00022). Расчёт матричных элементов сверхтонкой структуры выполнен при поддержке гранта Президента МК-2230.2018.2.

## Проблемы ab initio моделирования разогретого плотного вещества

*Стегайлов В.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*stegailov@gmail.com*

Появление квантовой механики позволило объяснить строение атомов и молекул, а ее дальнейшее развитие открыло эру расчета свойств вещества из первых принципов, которые оказали фундаментальное влияние на прогресс атомной физики, химии, физики конденсированного состояния и материаловедения. В настоящее время методы ab initio расчетов активно используются для исследования разогретого плотного вещества и плотной плазмы. Однако практика их применения в данной области выявляет существенные проблемы и ограничения, присущие соответствующим теоретическим подходам.

В докладе будут рассмотрены методы ab initio моделирования, основанные на теории функционала электронной плотности, методе квантового Монте Карло и методе волновых пакетов. Будут проанализированы возможности данных методов для описания равновесных и неравновесных свойств разогретого плотного состояния вещества, а также выделен ряд проблем и ограничений.

## Метод псевдопотенциала как универсальный инструмент для расчета молекул и твердых тел с тяжелыми переходными металлами, лантанидами и актинидами

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

*НИИ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина,*

*\*titov\_av@pnpi.nrcki.ru*

В докладе обсуждаются основы метода релятивистского псевдопотенциала, РПП (или релятивистского эффективного потенциала остова, РЭПО), исторические аспекты его становления и современный статус теории. Этот метод является приближением к подходу, основанному на решении релятивистских уравнений с использованием гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта. Однако, при использовании РПП на основе нерелятивистского (шрёдингеровского) гамильтониана с самой высокой точностью могут быть учтены не только наиболее важные релятивистские взаимодействия электронов с ядрами и межэлектронные, но и такие тонкие квантовоэлектродинамические эффекты как поляризация вакуума, собственная энергия и более высокие радиационные поправки. В основе метода РПП лежит идея замораживания химически неактивных остовных электронов при использовании построенного соответствующим образом оператора РПП. Метод РПП применен в большинстве расчетов электронной структуры и физико-химических свойств молекул с тяжелыми атомами. Это обусловлено рядом достоинств метода РПП: (а) только валентные химически активные электроны явно включены в расчет, (б) радиальные узлы больших компонент исходных четырехкомпонентных спиноров обычно сглаживаются в остовной области, (в) малые же компоненты в явной форме исключаются из расчетов с РПП. Показано, что теория радиально-локального РПП может быть построена на основе двух принципов (требований) - “жесткости” РПП в остова ( $r < R_c$ ) и его “физичности” в валентной области ( $r > R_c$ ).

Показано, что эти принципы также могут быть успешно применены при построения потенциалов встраивания кластера в кристалл (ПВКК) для исследований различных свойств материалов посредством кластерного моделирования их электронной структуры с высокой точностью. В первую это касается расчётов свойств “атомов в соединении”, таких как химические сдвиги (ХС) рентгеновских эмиссионных (флуоресцентных) спектров (РЭС) тяжелых атомов в эффективном кристаллическом окружении, тонкого и сверхтонкого расщепления, локализованных возбуждений и т.д. В ионно-ковалентных кристаллах ПВКК может быть представлен в виде линейной комбинации нелокальных (полулокальных) псевдопотенциалов для атомов ближнего окружения и совокупности эффективных зарядов на атомах дальнего окружения без явного включения электронов атомов окружения в расчет. “Основной кластер” рассматривается в рамках обычных приближений, используемых в расчетах молекул.

Кластерные расчеты с ПВКК особенно актуальны для изучения химического состояния (электронной конфигурации) тяжёлых переходных металлов (d-элементов), лантанидов и актинидов (f-элементов) в материалах, поскольку для них не существует надежных методов теоретического исследования. К числу таких кристаллов относятся тантало-ниобаты и другие минералы, которые рассматриваются в литературе как “природные матрицы” для иммобилизации (захоронения) высокоактивных ядерных отходов, в первую очередь актинидов.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-31-00022).

## Теоретические исследования наноструктур для их применения в качестве наноструктурированных термоэлектрических материалов

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

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

\*alex99@iph.krasn.ru

Прямое преобразование тепла в электричество с помощью термоэлектрических материалов (ТМ) является одним из наиболее перспективных решений множества серьезных экологических и энергетических проблем, стоящих перед человечеством. В последние годы был достигнут большой прогресс в улучшении их 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,  $\sigma$ -коэффициент электропроводности и k- коэффициент теплопроводности [1]. Современный прогресс в увеличении ZT в основном обусловлен уменьшением теплопроводности с помощью наноструктурирования. 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 данном докладе приводятся результаты теоретического исследования некоторых наноструктур, которые могут иметь хорошие термоэлектрические свойства. Для этого термоэлектрические параметры-S и  $\sigma$  рассчитывались квазиклассическим подходом на основе решения уравнения Больцмана с помощью пакета BoltzTraP [3].

В частности, были исследованы свойства некоторых фуллеритов, которые состоят из плотноупакованной твердотельной структуры, состоящей из молекул фуллеренов (C60 и C70) или эндоэдральных металлофуллеренов (EMF) (Ti2C2@C78, Sc@C82, Sc2@C82), где молекулы связаны слабыми силами ван-дер-Ваальса.

Показано, что хотя для некоторых фуллеритов на основе молекул C60, Ti2C2@C78, Sc@C82, Sc2@C82 коэффициент Зеебека S имеет огромные значения (1800  $\mu\text{V}/\text{K}$  for C60 и 1200  $\mu\text{V}/\text{K}$  for Sc@C82), тем не менее добротность для них недостаточно велика ввиду высокого значения диэлектрической щели и, соответственно, низкой электропроводности.

По этой причине мы исследовали также эффекты наноструктурирования для кристаллической структуры SiGe, которая является известным термоэлектрическим материалом. Точнее, были исследованы термоэлектрические свойства (S, $\sigma$ ) нанокомпозитов SiGe, состоящих из нанопроводов SiGe, соединенных между собой узкими контактами и образующих трехмерную структуру.

Показано, что замена атомов Si на Ge увеличивает коэффициент мощности  $P=S^2\sigma$  на 40

Также дискутируются предварительные результаты по расчету коэффициента теплопроводности наноструктурированных материалов, проведенные с помощью молекулярно-динамических расчетов.

Данная работа была поддержана российским научным Фондом (проект № 16-13-00060)

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. 2008 **93** 193121.
3. G.K.H. Madsen, D.J. Singh // Computer Physics Communications 2006 **175** 67–71

## Квантово-механическое рассмотрение рассеяния электронов в плотной и вырожденной плазме на основе метода фазового сдвига

Филиппов А.В.\*<sup>1</sup>, Старостин А.Н.<sup>1</sup>, Грязнов В.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, <sup>2</sup>ИПХФ РАН, Черноголовка,

\*fav@trinit.ru

В физике плазмы и астрофизике дальнедействующий характер кулоновского или гравитационного взаимодействия приводит к появлению различного рода расходящихся интегралов [1]. Для устранения расходимостей вводится кулоновский логарифм, определение которого в случае неидеальной плазмы встречается с определенными трудностями (см. [2,3] и цитированную в них литературу). При учете экранирования электрического поля иона некоторые проблемы снимаются, но точный учет многочастичного характера рассеяния электронов все еще представляет определенные трудности [4]. Эта задача достаточно просто решается в рамках борновского приближения, в рамках которого многочастичность учитывается через корреляционную функцию ионов, которая может быть найдена, например, путем численного решения интегрального уравнения Орнштейна-Цернике в гиперцепном приближении. В работе [4] было установлено, что в невырожденной плазме влияние корреляции ионов оказывается малой, а в вырожденной плазме их учет необходим только в случае, когда экранирование определяется только электронной компонентой. Но здесь возникает вопрос о границах применимости борновского приближения.

В настоящей работе для решения данных проблем рассеяние электронов рассмотрено на основе точного квантово-механического метода фазовых функций в плотной и вырожденной плазме. Показано, что борновское приближение в этих условиях мало применимо. Рассмотрены квазиклассические методы определения фазового сдвига и проведено их сравнение с “точными” расчетами фазового сдвига из уравнения Друкарева-Калоджеро [5–7]:

$$\frac{\partial \delta_l(r)}{\partial r} = -\frac{1}{k} \frac{2m_e}{\hbar^2} V(r) [j_l(kr) \cos \delta_l(r) - y_l(kr) \sin \delta_l(r)]^2 \quad (1)$$

с начальным условием

$$\delta_l(r=0) = 0. \quad (2)$$

Здесь  $V(r)$  – потенциал взаимодействия электрона и иона,  $\delta_l$  – функция фазового сдвига,  $l$  – орбитальный момент,  $k$  – волновой вектор электрона,  $j_l$ ,  $y_l$  – функции Риккати-Бесселя,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m_e$  – масса электрона.

Далее рассмотрены различные методы определения кулоновского логарифма в кинетической теории переноса и различные варианты выбора постоянной экранирования плазмы (с учетом или без учета вклада ионной компоненты) и граничного значения волнового вектора электронов. Проведено сравнение рассчитанных значений удельной электропроводности плазмы водорода с экспериментально измеренными в мегабарной области давлений.

1. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **7**, 203 (1937).
2. Л. Спитцер, *Физика полностью ионизованного газа*, Издательство Иностранной литературы, Москва, 1957 [Lyman Spitzer, Jr., *Physics of fully ionized gases*, Interscience Publishers
3. D.O. Gericke, M.S. Murillo, M. Schlages, *Phys. Rev. E* **65**, 036418 (2002).
4. А.Н. Старостин, В.К. Грязнов, А.В. Филиппов, ЖЭТФ, **153**, 514–524 (2018).
5. Г.Ф. Друкарев, Об определении фазы волновой функции при рассеянии частиц, ЖЭТФ, **19**, 247 (1949); G. F. Drukarev, *The Theory of Electron-Atom Collisions* (Academic Press, New York, 1965).
6. В.В. Бабилов, *Метод фазовых функций в квантовой механике*, Наука, Москва, 1968.
7. F. Calogero, *Variable phase approach to potential scattering*, Academic Press, New York and London, 1967.

### Построение потенциала встраивания в кристалл для фторидов иттербия

Шахова В.М.\*<sup>1</sup>, Ломачук Ю.В.<sup>1</sup>, Мосягин Н.С.<sup>1</sup>, Мальцев Д.А.<sup>1</sup>, Скрипников Л.В.<sup>1</sup>,  
Зайцевский А.В.<sup>2</sup>, Титов А.В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, <sup>2</sup>МГУ, Москва,

\*verahcnkrf@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 твёрдотельных 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.

В данной работе решалась задача построения надёжных кластерных моделей для кристаллов фторидов иттербия и моделирования потенциалов встраивания кластера в кристалл, чтобы электронная структура исследуемых соединений описывалась корректным образом в рамках построенных моделей. В предложенных моделях можно выделить две области:

- Первая, основной кластер – это центральный атом и его ближайшее окружение (первая координационная сфера), который описывается “явным” образом в расчёте. Для тяжёлого атома берётся такой псевдопотенциал, в котором остовные (внутренние) электроны исключены из расчёта, а валентные и внешние остовные электроны явно учтены.
- Вторая, потенциал встраивания – это “псевдоатомы”, которые окружают основной кластер и составляют собой “безэлектронный” потенциал встраивания в кристалл. Отметим, что потенциал встраивания состоит из ближнего и дальнего, которые моделируются в рамках различных приближений.

Критерием проверки предложенных моделей кластеров и потенциалов встраивания было то, что сумма квадратов сил, действующих на атомы основного кластера, была пренебрежимо мала. Стоит отметить, что исходная геометрия для построения кластеров была взята из эксперимента.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 14-31-00022. Расчёты выполнены с использованием оборудования центра общего доступа ПИК НИЦ Курчатовский институт – ПИЯФ.

1. N. S. Mosyagin, A. V. Zaitsevskii, A. V. Titov, *Int. Rev. At. Mol. Phys.* **1**, 63 (2010).

### Квантовые симуляторы

*Ланкин А.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*\*alex198508@yandex.ru*

Применение методов первопринципного численного моделирования позволяет значительно упростить и расширить возможности поиска новых материалов с заданными свойствами. 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 и число кубитов по числу частиц в изучаемой системе, а не экспоненциальное, как в существующих суперкомпьютерах. В этом важнейшее, решающее преимущество квантовых вычислений.

Построение универсального квантового компьютера сталкивается с существенными препятствиями и представляется технически трудноосуществимым на текущий момент. Однако реализация 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 лежит метод, основанный на построении, на основании значений молекулярных интегралов одноэлектронных орбиталей системы, эффективного гамильтониана с значением энергии основного состояния, пропорциональным энергии основного состояния квантовой системы с последующей её оценкой с помощью квантового алгоритма оценки фазы. 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.

В большинстве работ при построении квантового симулятора используется вентильная модель вычислений, при которой над входным вектором осуществляется заданная последовательность унитарных преобразований. Такая модель крайне уязвима к квантовой декогеренции и её трудно использовать для построения сложной системы без использования квантовых алгоритмов коррекции ошибок, что требует внесения в систему существенной избыточности, сегодня технически недостижимой. Однако существует иной подход к квантовым вычислениям, потенциально способный решить эту проблему с меньшей избыточностью системы – адиабатические квантовые вычисления, которые при достаточно низкой температуре системы, в силу наличия энергетической щели между состоянием, соответствующим результату вычислений, и прочими состояниями, защищены от декогеренции за счёт взаимодействия со средой. Важно, что на сегодняшний день существует доказательство возможности эффективной реализации на адиабатическом квантовом компьютере произвольного квантового алгоритма. Это особенно интересно, поскольку сейчас в системах такого рода, созданных D-Wave, удаётся создать намного больше кубитов (до нескольких тысяч), чем в любых других. Обсуждается вопрос применимости такого рода систем для решения задач квантовой химии и материаловедения.

### Квантовые компьютеры: проблемы и перспективы

*Ланкин А.В.*

*ОИВТ РАН, Москва,*

*Alex198508@yandex.ru*

Применение методов первопринципного численного моделирования позволяет значительно упростить и расширить возможности исследования новых веществ и материалов с заданными свойствами. Однако использование в этой области ставших уже традиционными методов квантовой химии 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 же приближённых методов, таких как DFT с полуэмпирическим обменно-корреляционным функционалом, даёт в результате вычисления сложно контролируемые ошибки и не может воспроизводить ряд существенных для свойств материала эффектов в том тех, которые не описываются в адиабатическом приближении. Это существенно ограничивает область применимости таких методов первопринципного моделирования.

Наличие этих принципиальных ограничений создаёт предпосылки для поиска иных подходов к решению квантовых задач. Таким может быть использование квантового компьютера. Использование квантовых вычислений позволяет решить квантовую задачу за полиномиальное время по числу частиц [1]. Однако построение универсального квантового компьютера на сегодняшний день сталкивается с существенными техническими препятствиями. Важнейшей из которых является проблема точности выполняемых операций и проблема квантовой декогеренции. Эти проблемы теоретически могут быть решены с использованием квантовых алгоритмов коррекции ошибок, но такой путь потребовал бы очень большого количества квантовых логических элементов, измеряемых несколькими миллионами. На текущем техническом уровне реализация такой системы пригодной для решения каких-то практических задач, по всей видимости, нереальна.

Иной путь — использование специализированных квантовых симуляторов, для которых гамильтониан, описывающий квантовую систему самого симулятора, оказывается сходен с тем, который описывает моделируемую. Этот путь напоминает использование аналоговых вычислительных систем на ранних этапах развития вычислительной техники. Данный метод позволяет обходиться существенно меньшим количеством квантовых элементов в системе и его уже удаётся использовать для решения некоторых простых квантово-механических задач [2,3]. Тем не менее, в этом направлении всё ещё остаётся не ясно насколько существенные и практически полезные результаты могут быть получены при использовании реалистичной элементной базы, и может ли этот путь дать лучшие результаты, чем использование традиционных подходов.

1. T. Grams Solving the Schrodinger Equation for the Feynman Quantum Computer// International Journal of Theoretical Physics. 1998. V. 37. No. 4. P. 1423 -1439
2. B.P. Lanyon, J.D. Whitfield, G.G. Gillett at al. Toward quantum chemistry on a quantum computer// Nature Chemistry. 2010. V. 2. P. 106 – 111
3. A. Kandala, A. Mezzacapo, K. Temme at al. Hardware-efficient variational quantum eigensolver for small molecules and quantum magnets// Nature. 2017. V. 549. P. 242 - 246

### **Распараллеливание вычислений и энергоэффективность микропроцессорных архитектур для суперкомпьютеров эксафлопсного уровня производительности: пример архитектуры Эпифани**

*Никольский В.П.\* , Стегайлов В.В.*

*ОИВТ РАН, НИУ ВШЭ, Москва,*

*\*thevsevak@gmail.com*

В июне была опубликована юбилейная 25-ая редакция мирового рейтинга суперкомпьютеров Top-500, которая ознаменовалась значительными перестановками в верхней части списка и преодолением новых уровней производительности. Новый лидер Summit (USA DOE ORNL) при тестировании показал производительность равную 122.3 Петафлоп, впервые превысив значение 100 Петафлоп. По заявлениям ORNL, при использовании арифметики пониженной точности для анализа генетических данных на этой машине была достигнута беспрецедентная производительность  $2 * 10^{18}$  операций в секунду. Смена лидера в рейтинге суперкомпьютеров свидетельствует о сохраняющейся заинтересованности государств в создании сверхмощных машин.

Ещё более интересным для нас стало развитие китайского суперкомпьютера Tianhe-2A: после замены устаревших ускорителей Xeon Phi многоядерными ускорителями Matrix-2000 он занимает четвертую строчку рейтинга. Учитывая Top-2 Sunway TaihuLight, два места в пятерке лучших обеспечены использованием оригинальных многоядерных архитектур. К сожалению, доступ к этим технологиям закрыт, поэтому для исследования свойств массово-параллельной многоядерной процессорной архитектуры мы используем открытый проект Parallella, включающий ускоритель с архитектурой Epiphany [1].

В рамках работы был разработан параллельный алгоритм классической молекулярной динамики (МД) с потенциалом Леннарда-Джонса. Высокую масштабируемость кода обеспечивает реализация метода декомпозиции данных по пространству. Для обмена данных используется набирающая новую популярность библиотека OpenSHMEM [2], с помощью которой реализуется парадигма параллельного программирования «Разделенное Глобальное Адресное Пространство» (PGAS) и механизм прямого удаленного доступа в память (RDMA), которые органично сочетаются с аппаратными принципами архитектуры Epiphany. Таким образом, были изучены и испытаны подходы к параллелизации на новой процессорной системе, выработаны методы создания эффективных масштабируемых кодов. В продолжение работ по исследованию производительности и эффективности МД кодов на различных архитектурах [3-5], мы публикуем результаты тестов разработанного кода и сравнение производительности и энергоэффективности с процессорами общего назначения сопоставимой мощности. Первые результаты представлены в статье [6].

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-37-00487 мол\_а.

1. Olofsson A., Nordström T., Ul-Abdin Z., Kickstarting high-performance energy-efficient manycore architectures with Epiphany // in 48th Asilomar Conf. on Signals, Systems and Computers. 2014. P. 1719.
2. J. A. Ross and D. A. Richie, Implementing OpenSHMEM for the Adapteva Epiphany RISC array processor // Procedia Computer Science. 2016. V. 80. Supplement C. P. 2353.
3. S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comp. Phys. 1995 V. 117. P. 1.
4. V. Nikolskiy, V. Stegailov, Floating-point performance of ARM cores and their efficiency in classical molecular dynamics // J. Phys.: Conf. Ser. 2016. V. 681. 012049
5. Nikolskiy V., Stegailov V., Classic Molecular Dynamics Algorithm for Many-core Processor Architecture Epiphany: Performance and Efficiency // in Parallel Computational Technologies 2018. P. 139
6. В.П. Никольский, В.В. Стегайлов, Эффективность процессоров архитектуры ARM для расчетов классической молекулярной динамики // Вычислительные Методы и Программирование. 2015. Т. 16. С. 578.
7. V. Nikolskii, V. Stegailov, Domain-decomposition Parallelization for Molecular Dynamics Algorithm with Short-ranged Potentials on Epiphany Architecture // Lobachevskii J. of Mathematics. 2018. I. 8.

## ПРИНЯТЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

*ГНЦ РФ ТРИНИТИ* — Государственный научный центр РФ Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований, Троицк,  
*ИВТЭ УрО РАН* — Институт Высокотемпературной Электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург,  
*ИФ СО РАН* — Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, Красноярск,  
*ИФВД РАН* — Институт физики высоких давлений Российской академии наук, Троицк,  
*ИХТТ УрО РАН* — Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, Екатеринбург,  
*МГУ* — Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова, Москва,  
*НГАСУ* — Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет, Новосибирск,  
*НИУ ВШЭ* — Национальный исследовательский университет Высшая школа экономики, Москва,  
*НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ* — Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова, Гатчина,  
*ОИВТ РАН* — Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, Москва,

## ЗАРЕГИСТРИРОВАВШИЕСЯ УЧАСТНИКИ КОНФЕРЕНЦИИ

1. Барсукова Анастасия Александровна, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(905)5837023, anastasiya.barsukova@phystech.edu
2. Воробьёв Алексей Станиславович, ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, phone: +7(922)2083519, alex2006-91@mail.ru
3. Захарова Анна Вадимовна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(951)6595707, zakharova.annet@gmail.com
4. Иваничкина Ксения Андреевна, ИВТЭ УрО РАН, Екатеринбург, phone: +7(932)1226550, ksjushajan@gmail.com
5. Козлов Максим Игоревич, МГУ, Москва, phone: +7(905)5604387, mikozlov94@gmail.com
6. Колотинский Даниил Александрович, ОИВТ РАН, Москва, , phone: +7(926)0759318, kolotinsky.daniil@yandex.ru
7. Кондратюк Николай Дмитриевич, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(919)7711778, kondratyuk@phystech.edu
8. Костенко Максим Геннадьевич, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, phone: +7(343)3623523, makskostenko@yandex.ru
9. Кузнецов Андрей Сергеевич, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(901)5807768, andrej.kuznecov@phystech.edu
10. Куриленков Юрий Константинович, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(495)4841647, kurilenkovyuri@gmail.com
11. Ланкин Александр Валерьевич, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(903)5768208, Alex198508@yandex.ru
12. Ленёв Дмитрий Юрьевич, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(985)1753037, lenevdy@mail.ru
13. Ломачук Юрий Вячеславович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(921)1845015, jeral2007@gmail.com
14. Мальцев Даниил Александрович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(921)9823292, danya.malcev@gmail.com
15. Николаев Владислав Сергеевич, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(918)7632884, vladiorussia@mail.ru
16. Никольский Всеволод Павлович, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(916)8058572, thevsevak@gmail.com
17. Норман Генри Эдгарович, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(925)0420997, genri.norman@gmail.com
18. Олейникова Елена Николаевна, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(985)9779203, oleynikova-en@mail.ru
19. Орехов Максим Александрович, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(495)7729590, fax: +7(495)7729590, mo2411@mail.ru
20. Просняк Сергей Дмитриевич, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(960)2441201, prosnyak.sergey@yandex.ru
21. Решетняк Виктор Витальевич, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, phone: +7(925)1510071, viktor.reshetnyak84@gmail.com
22. Рудяк Валерий Яковлевич, НГАСУ, Новосибирск, phone: +7(913)9137970, valery.rudyak@mail.ru
23. Сaitов Ильнур Миннигазыевич, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(925)3356941, saitovilnur@gmail.com
24. Сартан Роман Александрович, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(919)1084869, r.sartan@gmail.com
25. Свидерская Карина Сергеевна, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(967)1036357, sviderskayaks@gmail.com
26. Стегайлов Владимир Владимирович, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(495)4858545, stegailov@gmail.com
27. Тимофеев Алексей Владимирович, НИУ ВШЭ/ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(495)4859263, fax: +7(495)4857990, mail.timofeev.av@gmail.com
28. Титов Анатолий Владимирович, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(964)3638324, titov\_av@rnpnpi.nrcki.ru
29. Трофимов Юрий Алексеевич, НИУ ВШЭ, Москва, phone: +7(926)5260192, YuTrofimov@gmail.com
30. Федоров Илья Дмитриевич, ОИВТ РАН, Москва, phone: +7(915)0102337, ilya.d.fedorov@phystech.edu
31. Федоров Александр Семенович, ИФ СО РАН, Красноярск, phone: +7(904)8985175, alex99@iph.krasn.ru
32. Филиппов Анатолий Васильевич, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, Троицк, phone: +7(495)8415262, fav@triniti.ru
33. Фомин Юрий Дмитриевич, ИФВД РАН, Троицк, phone: +7(916)7007647, fomin314@mail.ru
34. Шарипов Зариф Алимжонович, ОИЯИ, Дубна, phone: +7(926)7845790, zarif@jinr.ru
35. Шахова Вера Михайловна, НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Гатчина, phone: +7(905)2323171, verahcnkrf@gmail.com