



XXII Всероссийская школа - семинар
по проблемам физики конденсированного
состояния вещества (СПФКС-22)

памяти М.И. Куркина

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

24 ноября - 1 декабря 2022 года

г. Екатеринбург

Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН
Институт теплофизики УрО РАН
Институт электрофизики УрО РАН
Уральский федеральный университет
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина
Уральское отделение Российской академии наук
ООО «Сигнифика»



Тезисы докладов

XXII Всероссийской школы–семинара
по проблемам физики конденсированного состояния вещества
памяти М.И. Куркина
(СПФКС–22)

24 ноября — 1 декабря 2022 года

г. Екатеринбург
2022

УДК 538.9(043.2)

ББК 22.37я431

В85

В85 XXII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти М.И. Куркина (СПФКС-22), Тезисы докладов, г. Екатеринбург, 24 ноября — 1 декабря 2022г., г. Екатеринбург: ИФМ УрО РАН, 2022, 301 с. (СПФКС-22)

ISBN 978-5-6045774-6-2

В сборнике тезисов докладов включены материалы XXII Всероссийской школы-семинара по проблемам физики конденсированного состояния вещества памяти М.И. Куркина (СПФКС-22). Место проведения — г. Екатеринбург и б/о «Солнечный остров», с. Мостовское. Время проведения 24 ноября — 1 декабря 2022г.

Ответственные за выпуск — Гудин С.А., Сташков А.Н.

Технический редактор — Игошев П.А.

ISBN 978-5-6045774-6-2

© Авторы, содержание тезисов, 2022

© ИФМ УрО РАН, оформление, 2022

СЕМЕЙСТВО СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

Р.А. Хабибуллин*, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

*e-mail: px@kpfu.ru

К настоящему времени предложено множество модельных потенциалов для описания взаимодействия молекул воды. Атомистические модели, такие как SPC/E [1, 2] и TIP4P/2005 [3], повторяют геометрию молекулы воды и предполагают учет взаимодействий отдельных атомов, что позволяет добиться высокой точности в воспроизведении различных физических свойств и аномалий. Существуют также и крупнозернистые (одноатомные) потенциалы [4, 5], которые обеспечивают более высокую производительность в численном моделировании, не уступая при этом в точности атомистическим моделям. С учетом данного обстоятельства закономерно возникает следующий вопрос: насколько можно упростить описание межмолекулярного взаимодействия для воды, сохранив при этом точность воспроизведения физических свойств? Чтобы на него ответить, мы исследовали наиболее простую из возможных форм межчастичных потенциалов — сферически симметричные потенциалы взаимодействия.

При помощи оригинального метода восстановления потенциалов межчастичного взаимодействия по структурным данным, реализованного на основе машинного обучения [6], было получено семейство из 13 эффективных парных потенциалов для различных температур вдоль изобары $P = 1$ атм. Данные термодинамические состояния соответствуют жидкой фазе воды вблизи кривой плавления. Восстановление потенциалов выполнялось по экспериментальным функциям радиального распределения $g(r)$ [7]. Полученное семейство может быть представлено выражением

$$u(r) = k(r) \cdot T + b(r), \quad (1)$$

где $k(r) \cdot T$ — вклад, зависящий от температуры, $T \in [254; 366]$ К.

Для проверки применимости восстановленных потенциалов были рассчитаны структурные (функции радиального распределения, температурная зависимость равновесной плотности) и транспортные характеристики (температурные зависимости коэффициента самодиффузии, вязкости, коэффициента теплопроводности) на основе результатов молекулярно-динамического моделирования. Полученные значения сопоставлены с известными экспериментальными данными [8, 9].

Работа выполнена при поддержке программы «Приоритет-2030». Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета.

1. H.J.C. Berendsen, J.R. Grigera, T.P. Straatsma, J. Phys. Chem. **91**, 6269 (1987).
2. S. Chatterjee *et al.*, J. Chem. Phys. **128**, 124511 (2008).
3. J.L.F. Abascal, C. Vega, J. Chem. Phys. **123**, 234505 (2005).
4. V. Molinero, E.B. Moore, J. Phys. Chem. B **113**, 4008 (2009).
5. H. Chan *et al.*, Nat. Commun. **10**, 379 (2019).
6. R. Storn, K. Price, J. Glob. Optim. **11**, 341 (1997).
7. L.B. Skinner, C.J. Benmore *et al.*, J. Chem. Phys. **141**, 214507 (2014).
8. J.V. Sengers, J.T.R. Watson, J. Phys. Chem. Ref. Data **15**, 1291 (1986).
9. M. Holz *et al.*, Phys. Chem. Chem. Phys. **2**, 4740 (2000).