



XIX Всероссийская конференция

**ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ
ТВЁРДОГО ТЕЛА
И ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ**

**Сочи, пансионат «Буревестник»
18–27 сентября 2020 г.**

ТЕЗИСЫ

Министерство науки и высшего образования РФ
Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН
Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН
Московский Государственный Университет им. М. В. Ломоносова

ХІХ Всероссийская конференция
«Проблемы физики твердого тела
и высоких давлений»

г. Сочи, пансионат «Буревестник»
18 – 27 сентября 2020 г.

ТЕЗИСЫ

Москва, ФИАН 2020

УДК 538.9(043.2)
ББК В37я431 + В367.1я431

Главный редактор В. Н. Рыжов д.ф.-м.н. (ИФВД РАН)
Ответственный редактор В. Е. Анкудинов к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

Редакционная коллегия: В. В. Бражкин, академик РАН, д.ф.-м.н. (ИФВД РАН); П. И. Арсеев, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФИАН); А. А. Федянин, д.ф.-м.н., проректор (МГУ им. М. В. Ломоносова); В. Е. Антонов, д.ф.-м.н. (ИФТТ РАН); М. М. Глазов, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. (ФТИ им. А. Ф. Иоффе); С. В. Демишев, д.ф.-м.н. (ИОФ РАН); Е. Н. Циок, к.ф.-м.н. (ИФВД РАН)

Проблемы физики твердого тела и высоких давлений:
К26 Тезисы XIX Всероссийской конференции, г. Сочи, пансионат «Буревестник», 18–27 сентября 2020 г. – Москва–Сочи: Изд-во ФИАН, 2020. – 179 с.

Problems of solid state physics and high pressure science:
Abstracts of the XIX All-Russian Conference, Sochi, “Burevestnik” pension, September, 18–27, 2020. – Moscow–Sochi: LPI RAS Publ., 2020. – 179 p.

ISBN 978-5-902622-40-6

XIX Всероссийская конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» продолжает регулярную серию школ, которые проводились Институтом физики высоких давлений РАН каждые два года, начиная с 1989 г. С 2015 года Школа-конференция проводится ежегодно совместно с Физическим институтом РАН. В данный сборник входят как тезисы лекций приглашенных лекторов, так и тезисы оригинальных докладов молодых участников.

ISBN 978-5-902622-40-6

УДК 538.9(043.2)
ББК В37я431 + В367.1я431

© Коллектив авторов, 2020
© ФИАН, 2020

графита с высоким содержанием бора не уширяются. Это явление заслуживает дальнейшего исследовательского внимания.

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФИ (№ 19-12-00111).

Литература

1. T. Nagio, M. Nakamizo, and K. Kobayashi. Carbon. **27**, 2, **1989**

ЧИСЛЕННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КЛАТРАТНЫХ ГИДРАТОВ

Юнусов М. Б., Хуснутдинов Р. М., Мокшин А. В.
*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Институт физики, Казань, Россия
mikhamadbek@mail.ru*

Клатратные гидраты – это кристаллические соединения, которые состоят из каркаса, образованного молекулами воды, и полостей, в которые включены молекулы-гости. Гидраты природного газа представляют большой интерес для исследований. Во-первых, они рассматриваются как источник углеводородного топлива. По оценкам специалистов, запасы газа в гидратах составляют около $2 \cdot 10^{16}$ м³, что на порядки превосходит запасы обычного природного газа. Во-вторых, в газовой отрасли остро стоит проблема гидратообразования в стволах скважин и газопроводах. Природный газ в трубах отлагается на стенках в виде гидратов, что снижает эффективность её добычи.

В настоящей работе представлены результаты первопринципного молекулярно-динамического исследования электронных и теплофизических свойств гидрата метана с кубическими структурами КС-I и КС-II. На основе результатов рентгеноструктурного анализа Штакельберга и Мюллера, а также алгоритма оптимизации положений атомов водорода с помощью правил Бернала-Фаулера получены кристаллические структуры клатратных гидратов КС-I и КС-II. Гидрат метана получен путем внедрения в свободные полости ячейки молекул CH₄. Каждая из ячеек моделирования имела размер 12×12×12 Å и включала 178 атомов. Крупномасштабные квантово-механические расчеты выполнялись в программном комплексе VASP для широкой области температур

$T = [200; 300]$ К. Шаг по температуре составил 20 К. Моделирование выполнялось в изотермически-изохорическом (NVT)-ансамбле. Для установления состояния термодинамического равновесия был применен термостат Нозе-Гувера. Во избежание нежелательных поверхностных явлений и эффекта конечномерной системы, на моделируемую ячейку по всем направлениям были наложены периодические граничные условия. Базисный набор состоял из плоских волн, электрон-ионное взаимодействие осуществлялось с помощью ультрамягких сглаженных псевдопотенциалов, обменно-корреляционный функционал использовался в приближении Бекке-Ли-Янга-Парра (BLYP).

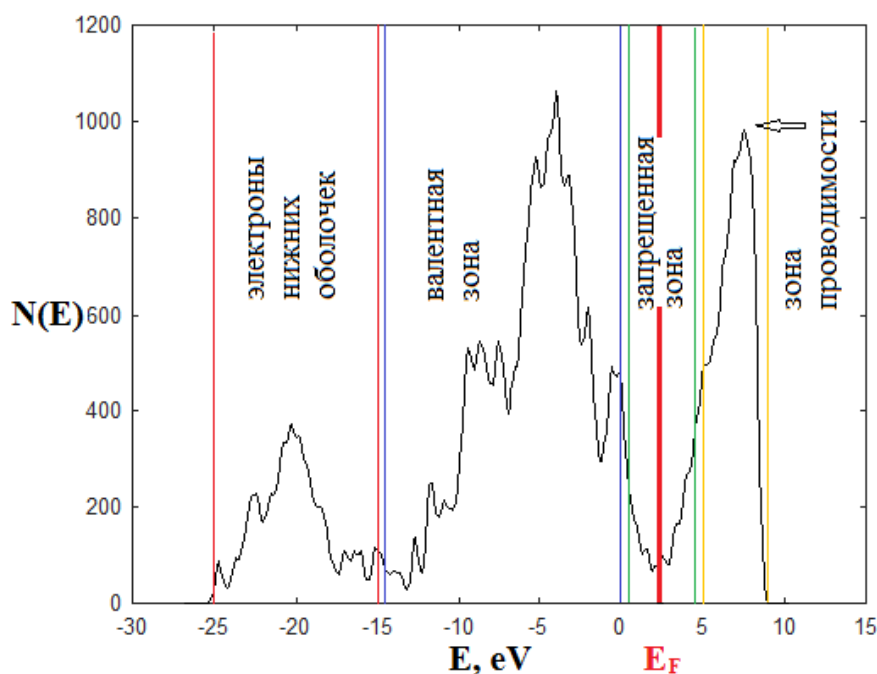


Рис.1. Плотность электронных состояний системы при $T=200$ К для газового гидрата со структурой КС-I.

На основе данных моделирования была найдена температурная зависимость полной энергии системы в диапазоне температур $200 \div 300$ К, которая была аппроксимирована следующей линейной зависимостью:

$$E(T) = 3.748 \cdot 10^{-21} \cdot T + 1.374 \cdot 10^{-16} \text{ (Дж)}.$$

Средняя теплоемкость при постоянном объеме рассчитывалась по формуле:

$$C_v = \frac{dQ}{dT} = \frac{dE + pdV - \mu dN}{dT} = \frac{dE}{dT}.$$

Полученное значение составило $2362.5 \text{ Дж/кг}\cdot\text{K}$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением для гидрата метана ($2160\pm 100 \text{ Дж/кг}\cdot\text{K}$). Для структуры КС-I была получена плотность электронных состояний (см. рис.1), а также детально исследованы температурные зависимости ширины запрещенной зоны ΔE_G и положения уровня ферми E_F .

Крупномасштабные молекулярно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа поддержана грантом РФФИ (№18-02-00407-а).