



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

потенциал взаимодействия обычно является известным. Однако для подавляющего большинства реальных физических систем приходится решать задачу нахождения энергии взаимодействия частиц.

В настоящей работе предлагается оригинальный метод по восстановлению потенциалов межчастичного взаимодействия, который реализуется на основе эволюционных алгоритмов [1]. В качестве входной информации используются экспериментальные данные по дифракции нейтронов и рентгеновских лучей. В частности, в рамках данного метода удается получить интересные результаты для конденсированных многочастичных систем, где межчастичное взаимодействие носит преимущественно сферически-симметричный характер. Также нами рассматривается задача о воссоздании потенциала взаимодействия молекул воды (жидкая фаза вблизи плавления) [2].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 19-12-00022) и РФФИ 18-02-00407.

Литература

1. R. Storn, K. Price, J. Glob. Opt., **11**, 341, **1997**
A. B. de Oliveira, G. Franzese, P. A. Netz, M. C. Barbosa, J. Chem. Phys., **128**, 064901, **2008**

УПРУГИЕ СВОЙСТВА И СТЕКЛОФОРМИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ БИНАРНЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ

Хуснутдинов Р. М., Мокшин А. В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Институт физики, Казань, Россия
khrm@mail.ru*

Вязкость является одной из важнейших характеристик, определяющая релаксационные особенности и транспортные свойства вещества. В то же время, температурная зависимость вязкости определяет так называемую стеклообразующую способность системы (*glass-forming ability*) через величину индекса хрупкости (*fragility index*). Косвенные экспериментальные методики, такие как неупругое рассеяние нейтронов и рентгеновских лучей, бриллюэновское рассеяние света характеризуются значительными неточностями в определении коэффициента вязкости. В то же время, определение

вязкости с помощью вискозиметрии сопряжено со значительными трудностями, обусловленные в первую очередь, низкой чувствительностью и несовершенством экспериментальных методик. Другой альтернативой в нахождении вязкости являются методы классического и квантовомеханического моделирования, которые характеризуются рядом серьезных ограничений: первые – точностью и предсказательной способностью потенциалов межатомного взаимодействия, вторые – наличием приближений в обменно-корреляционном потенциале и ограниченностью временных масштабов симуляций.

В работе исследуются вязкоупругие и квазитвердотельные свойства никельсодержащих бинарных металлических расплавов для широкой области значений температур, включая область равновесной жидкой фазы и переохлажденного расплава. Целью настоящего исследования является уточнение данных по вязкости для систем $Al_{(100-x)}Ni_x$ и $Fe_{(100-x)}Ni_x$, а также выявление особенностей квазитвердотельного поведения в различных никельсодержащих металлических расплавах. Результаты моделирования для концентрационных и температурных зависимостей вязкости для этих систем находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Установлено, что значительный рост вязкости наблюдается при концентрациях никеля $x_{Ni}=60\div 80\%$ и $x_{Ni}=30\div 50\%$ для расплавов $Al_{(100-x)}Ni_x$ и $Fe_{(100-x)}Ni_x$ соответственно. Кроме того, в области низких значений концентраций $x_{Ni}\sim 5\%$ наблюдаются аномалии, как в сдвиговой, так и кинематической вязкости для расплава $Fe_{(100-x)}Ni_x$. Детальный анализ упругих свойств был выполнен на основе численных расчетов модулей всестороннего сжатия и сдвига, коэффициента Пуассона и модуля Юнга. Установлено, что на диапазоне концентраций атомов никеля в системах $Fe_{(100-x)}Ni_x$ и $Al_{(100-x)}Ni_x$ модули упругости изменяются в 2 и 3 раза соответственно. Рассчитанные значения концентрационных зависимостей скоростей продольного и поперечного звука демонстрируют корреляцию со значениями вязкости. Ширины щелей k_{gap} в законе дисперсии поперечных коллективных мод, как для расплава $Al_{(100-x)}Ni_x$, так и для $Fe_{(100-x)}Ni_x$ с температурой описываются линейными зависимостями.

Крупномасштабные атомарно-динамические расчеты выполнены на вычислительном кластере Казанского федерального университета и суперкомпьютере Межведомственного Суперкомпьютерного Центра Российской Академии Наук. Работа поддержана Российским Научным Фондом (проект №19-12-00022).

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

Исследование выполнено при поддержке гранта РФФ (№ 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