

2-ая Всероссийская школа-семинар «НАНОСТРУКТУРЫ, МОДЕЛИ, АНАЛИЗ И УПРАВЛЕНИЕ»

АННОТАЦИИ ЛЕКЦИЙ И ДОКЛАДОВ

*Московский институт электроники и математики
23-26 ноября 2009 года*

В.А. Аветисов

зав. лаб. теории сложных систем, Институт химической физики РАН

Моделирование прототипов молекулярных наномашин и р-адическая математическая физика

Лекция I знакомит слушателей с "природными" нано-машинами – белками. С белковыми молекулами связано много легенд и загадок. Это удивительные структуры. Они осуществляют едва ли не все биохимические процессы в живой клетке, причем очень точно. Возникает впечатление, что флуктуационно-динамическая подвижность белковой молекулы контролирует функцию белка от "элементарных событий" на масштабах $\sim 10^{-2}$ нм и $\sim 10^{-10}$ сек и до событий масштаба ~ 10 нм и ~ 100 сек. (Собственно говоря, это и есть "нано-машина".) Уже только по этой причине математическое моделирование флуктуационно-динамической подвижности белков (а значит и работы нано-машины) представляется нетривиальной задачей.

С физической точки зрения подвижность белковой молекулы (как и любой многоатомной структуры) определяются ее энергетическим ландшафтом (ЭЛ). Никто не знает точно, каков ЭЛ белка. Но теоретические оценки и компьютерные исследования (с неко-

торыми из них мы тоже познакомим слушателя на I-ой лекции) показывают, что ЭЛ структур белкового типа (почти наверное) представляют собой "сильно пересеченные" многомерные энергетические поверхности с астрономически большим числом локальных минимумов и седловых точек, например, таким как 10100. Аналитическое описание подобных ЭЛ и динамики на таких ЭЛ представляется безнадежной задачей и надежды (весьма иллюзорные) возлагаются здесь, в основном, на компьютерное моделирование. Понятно, что для аналитических подходов, если продолжать на них настаивать, требуются адекватные приближения. (Впрочем, это же относится и к компьютерным моделям.) Вопрос в том, что такое "адекватное приближение". Уже на I-ой лекции мы познакомимся с одним из таких приближений – представлением многомерных сильно пересеченных ЭЛ иерархическими древообразными графами. В этом случае моделью флуктуационно-динамической подвижности системы становится случайный процесс на пространстве "древовидной топологии". Этому посвящена лекция II. Но прежде, на лекции I, рассказывается о знаменитых экспериментах по спектральной диффузии в белках, где удалось наблюдать флуктуационно-динамическую подвижность белковых молекул на 12 временных порядках (!) от $\sim 10^{-6}$ сек. до 10^6 сек.

Оказалось, что подвижность белковых молекул демонстрирует странные свойства. Некоторые из них можно понимать как то, что многомасштабная белковая подвижность похожа на "броуновское движение", но другие явно показывают, что это никак не "броуновское движение". Причем оказалось, что флуктуационно-динамическая подвижность нативных (нативных) белковых молекул радикально отличается от флуктуационно-динамической подвижности "разрушенных" (денатурированных) белков. Если теперь обратиться к "древовидным" моделям динамики на сильно пересеченном ЭЛ, то возникает простой вопрос: – "каким должно быть то дерево, на каком блуждает натуральный белок"?

Оказывается, белок "блуждает" на ультраметрическом дереве. О том, что такое "ультраметрическое дерево" и что такое "ультраметрическое случайное блуждание", идет речь во II-ой лекции. Об этом рассказывается сначала на языке решеточной модели, а затем показано, как р-адические числа превращают эту картину в изящную математическую конструкцию р-адического кинетического уравнения. Конечно, мы даем только поверхностное представление о том, как решаются такие р-адические уравнения. Мы показываем как можно строить р-адические математические модели флуктуационно-динамической подвижности макромолекул с тем, чтобы описывать различные эксперименты. Проблема тут еще и в том, что "флуктуационно-динамическую подвижность макромолекулы", как правило, не наблюдают, а наблюдают только меняющееся во времени состояние "отдельного атома" многоатомной структуры, которое как-то связано с подвижностью всей макромолекулы. Поэтому между модельным описанием флуктуационно-динамической подвижности макромолекулы и наблюдаемой (в конкретном эксперименте) должна быть проложена вполне определенная связь, которая также является важным элементом модельного описания эксперимента.

На лекции III мы занимаемся именно этим (очень поучительным) делом, как раз в отношении экспериментов по спектральной диффузии в белках. Мы снова рассматриваем свойства спектральной диффузии в белках и получаем эти свойства прямо из предположения о том, что белковая подвижность есть ультраметрическое случайное блуждание. При этом, мы явным образом используем р-адическое уравнение ультраметрического случайного блуждания для описания свойств спектральной диффузии в белках. Совпадение теории с экспериментом производит тут столь сильное впечатление, что предметом обсуждения становится вопрос: почему "абстрактное" р-адическое уравнение тут так прекрасно работает?

В результате всего этого, к концу лекции III у нас в руках оказывается простое радическое кинетическое уравнение, которое претендует на описание многомасштабной подвижности белка. Вот тогда мы и сможем поговорить о перспективах математического моделирования динамических прототипов молекулярных нано-машин.

О.Е. Глухова

Саратовский государственный университет

Углеродные нанокластеры в электрическом поле: строение, размерные эффекты, электронные свойства, работа выхода

"Углеродные нанокластеры": этот термин охватывает все известные углеродные наноструктуры, такие как фуллерены, торы, нанотрубки и др. Для систематизации свойств углеродных нанокластеров проведена их классификация. Классификационными признаками являются закономерности позиционирования пяти- и шестиугольников атомной клетки относительно осей и плоскостей симметрии. Отличие такого подхода заключается в том, что помимо соотнесения к той или иной группе симметрии задействованы особенности расположения характерных групп пятиугольников относительно элементов симметрии. Проведена классификация углеродных нанокластеров, в частности топологических моделей высокосимметричных фуллеренов, акиральных тубулярных нанокластеров (УТН), многослойных фуллеренов и УТН с локальными дефектами каркаса. На основании проведенной классификации установлены признаки физической стабильности нанокластеров с позиции топологии атомного каркаса.

Моделируется и изучается влияние внешнего электрического поля на атомное строение, электронную структуру и свойства углеродных нанокластеров. Разработанная методика исследования наноструктур во внешних полях основывается на методе сильной связи и теории диполей на связях. Вычисленные по этой методике коэффициенты поляризуемости фуллеренов и нанотрубок хорошо согласуются с аналитическими и численными расчетами другими квантово-химическими методами. Методика включает в себя алгоритмы численной оценки влияния электрического (не зависящего от времени) поля на топологию атомной клетки, электронный спектр, энергетическую щель, потенциал ионизации, а также алгоритмы расчета поляризуемости и пондеромоторной силы.

В рамках построенной модели нанокластера в поле получены новые результаты относительно поведения и свойств кластеров во внешнем пространственно-однородном электростатическом поле заключается в следующем:

- во внешнем продольном, или аксиальном (силовые линии совпадают с осью симметрии тубуса), поле УТН удлиняются на нескольких процентах, как следствие воздействия на атомный каркас пондеромоторной силы. Большую деформацию со стороны пондеромоторной силы испытывают УТН большего диаметра, как, например, на трубку (3,3) действует сила 4,7 нН, трубку (4,4) – 6,0 нН, трубку (5,5) – 6,6 нН;
- в поперечном поле УТН незначительно укорачиваются и утолщаются на десятки доли процента, поскольку радиальная жесткость УТН больше продольной;
- потенциал ионизации при непрерывном увеличении напряженности уменьшается до некоторого минимума, после чего возрастает с дальнейшим ростом напряженности;

– максимальная поляризуемость УТН наблюдается в направлении оси симметрии тубуса атомного каркаса, что вызвано перераспределением электронной плотности вдоль оси тубуса;

– в электрическом поле, как и при его отсутствии, у УТН типа *кресло* с увеличением длины атомного каркаса наблюдается эффект осцилляции ионизационного потенциала;

Оценено влияние электростатического поля на эмиссионную способность УТН: в поперечном поле работа выхода несколько увеличивается, а в аксиальном снижается. Исследование УТН в аксиальном поле с непрерывно нарастающей напряженностью выявило новую закономерность: при определенном значении напряженности поля потенциал ионизации и работа выхода УТН снижаются до 0,96-0,97 первоначальной величины (т.е. в отсутствии поля). Минимум работы выхода для трубок большего диаметра достигается при больших значениях напряженности.

Таким образом, установлено, что электростатическое поле изменяет атомное строение УТН и электронную структуру, что может привести в случае аксиального поля к снижению работы выхода.

Литература

1. Глухова О.Е., Колесникова А.С. Углеродные нанотрубки в однородном электрическом поле // Нелинейный мир, 2009, 7 (6), 478-479.
2. Глухова О.Е. Тонкие углеродные тубулярные нанокластеры в однородном электростатическом поле // Нано- и микросистемная техника, 2008, 7, 8-12.

И.Я. Ерухимович

Институт элементо-органических соединений РАН

Полимерные наноструктуры: эксперимент, теория, перспективы

Полимерные системы представляют собой замечательный пример реализации подхода к формированию наноструктур «снизу вверх», то есть в результате образования более или менее термодинамически равновесных наноструктурированных систем из надлежащим образом подобранных сложных структурных единиц. Такие полимерные наноструктуры могут быть макроскопическими нанорешётками, обладающими симметрией той или иной пространственной группы с периодом $L \sim 10-100$ nm, или мицеллами, состоящими из одной или нескольких макромолекул. Особенности полимерных систем являются возможность целенаправленного формирования (на масштабах $\sim 10^2 - 10^4$ nm и больше) нанорешёток заданной симметрии и естественные ограничения на совершенство таких решёток, связанные с наличием в них термодинамического равновесия.

В лекции будет представлен обзор наиболее типичных экспериментально наблюдаемых полимерных нанорешёток (и, в меньшей степени, мицеллярных образований). Значительная часть лекции будет посвящена изложению теоретических представлений и результатов, лежащих в основе целенаправленного дизайна полимерных наноструктур и полученных путём объединения микроскопического описания макромолекулярных систем и феноменологической теории слабой кристаллизации, заложенной ещё Ландау и значительно модифицированной в ходе исследования полимерных наноструктур. Обсуждаются наиболее перспективные приложения полимерных наноструктур и их место в современной физике твёрдого тела.

**Е.А. Зубова, М.А. Мазо, Н.А. Ковалева,
И.П. Кикоть, А.В. Онуфриев, Л.И. Маневич**

Институт химической физики РАН

Крупнозернистая модель ДНК: новая методика построения

Структура и механическое поведение молекулы ДНК всегда вызывали большой интерес. Он объясняется не только важностью этой молекулы для биологических функций ДНК, но и возможностью применения ее в новых технологиях. Одной из эффективных методик исследования структуры молекулы ДНК и ее комплексов с белками является молекулярно-динамическое моделирование. Оно позволяет изучать различные свойства таких систем на молекулярном и мезоскопическом уровне. Однако современные вычислительные мощности ограничивают использование имеющихся молекулярных моделей довольно небольшими масштабами как по времени (несколько десятков наносекунд), так и по размеру рассматриваемых систем (несколько десятков пар оснований). Но большинство важных структурных перестроек, например, таких как А-В переход или раскрытие оснований, имеет гораздо больший масштаб по времени и поэтому не может наблюдаться в молекулярно-динамическом полноатомном моделировании без введения искусственных воздействий.

В этой ситуации становится актуальным использование крупно-зернистых моделей. Но существующие на данный момент крупно-зернистые модели имеют весьма ограниченное применение. Связано это с тем, что при их разработке основной упор делается не на учет реальной внутримолекулярной подвижности, а на воспроизведение какого-то одного результата (например, зависимости температуры плавления от последовательности оснований). Таким образом, каждая существующая крупно-зернистая модель пригодна лишь для моделирования какого-то одного, довольно узкого, класса явлений. Напротив, при построении нашей модели мы исходили из анализа структуры и внутренней подвижности молекулы. Такой подход, как мы надеемся, сможет предоставить надежные данные о механических свойствах молекулы ДНК и позволит изучать механизмы конформационных переходов и раскрытия двойной спирали.

При построении модели ключевым моментом является выбор зерен. Атомы объединяются в группы в соответствии с их функциональной ролью так, чтобы основная подвижность сахарофосфатного остова, наблюдаемая в полноатомном моделировании, заключалась бы не внутри зерен, а в их движении и взаимодействии. Каждый нуклеотид разделен на 6 зерен: одно фосфатное зерно, два зерна для рибозного кольца и три зерна на каждое основание. Полученные потенциалы позволяют описывать две устойчивых конформации, которые соответствуют двум формам ДНК – А и В. Параметры потенциалов были получены на основе расчета отдельных фрагментов (силовое поле AMBER parmbsc0), а также по результатам молекулярно-динамического моделирования. В настоящее время производится окончательная отладка модели и более тонкая настройка параметров.

М. В. Карасев, Д. Ю. Нескоромный

Московский институт электроники и математики

Магнито-метрические квазичастицы в спинтронике

Для заряженной частицы со спином, движущейся по искривлённой поверхности, помещенной в магнитное поле, в случае, когда спин-орбитальное взаимодействие доминирует над кинетической энергией (режим спинтроники), на «нижних» уровнях энергии мы вычисляем второй член асимптотики эффективных гамильтонианов как функций на квантовой поверхности. Результат выражается в чисто геометрических (инвариантных) терминах. Полученные гамильтонианы описывают эффективные квазичастицы, локализация которых определяется неоднородностью магнитного поля и спин-орбитального тензора, а также искривлением поверхности, как в [1-4].

Рассматривается оператор типа Шредингера $\hat{H} = uS_j^k \sigma^j \hat{p}_k + g^{jk} \hat{p}_j \hat{p}_k / 2m$ (здесь m - эффективная масса) над двумерным конфигурационным пространством M с римановой метрикой g . Структура тензора S на поверхности M определяет тип спин-орбитального взаимодействия (Дрессельхаус, Рашба, и т.п.); предполагается, что S нигде не вырожден. Величина спин-орбитального взаимодействия задается скоростью «релаксации» u . В спинтронных материалах (сверхрешетках), где спин-орбитальное взаимодействие велико, естественно считать, что спиновая длина волны $l_u = \hbar / mu$ много меньше характерного масштаба l искривления поверхности M .

Пусть, к тому же, данная спинтронная система помещена в магнитное поле, которое нигде не касается поверхности M . Координаты q^j на поверхности, а также компоненты кинетического импульса $\hat{p}_j$ и спиновые компоненты σ^j ($j=1,2$) будут тогда подчинены следующим коммутационным и антикоммутационным соотношениям [4]:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_j, \hat{p}_k]_- &= -i \frac{\hbar e}{c} B_{jk} - \frac{\hbar^2}{4} R_{lmjk} \sigma^l \sigma^m, \\ [\sigma^j, \sigma^k]_+ &= 2g^{jk}, \\ [\hat{p}_j, \sigma^k]_- &= i\hbar \Gamma_{jl}^k \sigma^l, \\ [q^j, \hat{p}_k]_- &= i\hbar \delta_k^j, \\ [q_j, \sigma^k]_- &= 0, \\ [q^j, q^k]_- &= 0. \end{aligned}$$

Здесь B – тензор магнитного поля на поверхности M , а R, Γ – тензор кривизны и символ Кристоффеля метрики g на поверхности.

Предположим, что магнитное поле не слишком мало так, что характерная магнитная длина l_B много меньше масштаба искривления l , и в то же время, поле не очень велико так, что магнитная длина много больше спиновой длины l_u .

Теорема. Минимальные по модулю (или «нижние») уровни энергии оператора

$$\hat{H} = uS_j^k \sigma^j \hat{p}_k + \frac{1}{2m} g^{jk} \hat{p}_j \hat{p}_k$$

и соответствующие им собственные подпространства разбиваются на кластеры, которые можно занумеровать числами $n=0,1,2, \dots$ и знаками $\pm$ (направление спина). Кластер с номером $n, \pm$ задается спектром и собственными подпространствами эффективного гамильтониана (описывающего эффективную квазичастицу):

$$\hat{H}_n = \pm \hbar u k_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{4m} \text{tr}(g^{-1} S^{-1} g S^{-1}) + \dots$$

в алгебре с коммутационными соотношениями между координатами:

$$[\hat{q}^j, \hat{q}^k]_- = -i \frac{\hbar c}{e} B^{-1jk}(\hat{q})$$

на квантовой поверхности M . Через k_n здесь обозначена скалярная функция на поверхности M (можно назвать ее спин-магнитным волновым числом квазичастицы)

$$k_n = \sqrt{\frac{(2n+1)e}{\hbar c} \sqrt{\frac{\det B}{\det g}} |\det S|},$$

а многочлен в формуле для гамильтониана $\hat{H}_n$ обозначает высшие члены асимптотики по малым параметрам l_B/l и l_u/l_B .

Приведенная в этой теореме формула для гамильтонианов квазичастиц обобщает формулы, полученные ранее в [1, 2].

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 09-01-00606-а.

Литература

1. Karasev M.V. Magneto-metric Hamiltonian on Quantum Surfaces in the Configuration Space // Russ.J.Math.Phys., 2007, **14**, 55–65.
2. Karasev M.V. Internal geometric current, and the Maxwell equation as a Hamiltonian system on configuration surfaces // Russ. J. Math. Phys., 2007, **14**, 134–141.
3. Karasev M.V. Geometric Dynamics on Quantum Nano-Surfaces and Low-Energy Spectrum in Homogeneous Magnetic Field // Russ. J. Math. Phys., 2007, **14**, 440–447.
4. Karasev M.V. Quantum geometry of nano-space // Russ.J.Math.Phys., 2008, **15**, 417–420.

**В.Л. Ковалев, А.А. Крупнов, М.Ю. Погосбекян,
А.Н. Якунчиков, А.П. Суханов**

Московский государственный университет, мехмат

Моделирование каталитических свойств материалов методами классической и квантовой динамики

Актуальность исследования каталитических свойств теплозащитных покрытий связана с разработкой перспективных гиперзвуковых летательных аппаратов, для которых разрабатываются новые материалы, обеспечивающие тепловую защиту при температурах поверхности около 2000 К. При гиперзвуковом обтекании гетерогенные каталитические процессы определяют более половины потока тепла к поверхности тела. До настоящего времени гетерогенные каталитические процессы на теплозащитных покрытиях космиче-

ских аппаратов остаются недостаточно изученными как в теоретическом, так и в экспериментальном плане [1-2]. Лучше понять механизм гетерогенных каталитических процессов, проанализировать их элементарные стадии и оценить влияние пространственной структуры поверхностного слоя на каталитические явления позволили новые подходы, основанные на квантовой механике и молекулярной динамике [3-5]. Их использование стало возможным в связи с развитием современной суперкомпьютерной техники. В работе анализируются и проводятся новые результаты исследований, посвященных указанной проблеме.

Водород является высокоэффективным и экологически чистым энергоносителем. Эффективным способом хранения водорода является хранение его в адсорбированном состоянии углеродными нанотрубками, которые химически стабильны, имеют большую площадь поверхности, незначительную массу и сравнительно недороги. В работе разработан эффективный метод прямого численного моделирования и проведено молекулярно-динамическое моделирование процессов физической адсорбции водорода в массиве углеродных нанотрубок при температурах 80–300К. Найдена оптимальная геометрия пучка для адсорбции [6,7]. Обнаружено, что внутри массива водород группируется слоями, которые могут пересекаться, накладываться друг на друга. Расчеты показали, что относительное массовое содержание водорода растет с увеличением расстояния между трубками g и выходит на значение для массива из далеко расположенных трубок (Рис.4). Плотность водорода в системе имеет максимум при $g \approx 10A$. В этой точке при $p=50$ атм плотность примерно в 2.4 выше, чем при хранении водорода в газообразном состоянии при той же температуре и давлении. Таким образом, при заданном объеме хранилища масса запасенного водорода будет в 2.4 раза больше, чем при хранении без использования наноструктур при тех же условиях. Расчеты также показали, что при комнатной температуре величины относительного массового содержания и плотности водорода ниже, чем соответствующие значения для водорода в газообразном состоянии при тех же условиях.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект N 08-01-00230 а). Расчеты проводились на СКИФ-МГУ "Чебышёв".

Литература

1. Ковалев В.Л. Гетерогенные каталитические процессы в аэротермодинамике // М.: Физматлит, 2002, 224 с.
2. Ковалев В.Л., Крупнов А.А. Влияние образования оксида азота в гетерогенных каталитических реакциях на тепловые потоки к поверхности многоразовых космических аппаратов // Вестник Московского университета. Сер. 1. Математика. Механика, 2004, 1, 31-36.
3. Ковалев В.Л., Погосбеян М.Ю. Моделирование гетерогенной рекомбинации атомов на теплозащитных покрытиях космических аппаратов методами молекулярной динамики // Известия РАН, МЖГ, 2007, 4, 176-183.
4. Ковалев В.Л., Крупнов А.А., Погосбеян М.Ю., Суханов Л.П. Моделирование гетерогенной рекомбинации атомов кислорода на поверхности Al_2O_3 методами квантовой механики и молекулярной динамики // Международный форум по нанотехнологиям, 3-5 декабря 2008, Москва. Сборник тезисов докладов научно-технологических секций, т. 2, с. 229-230 (2008).
5. Ковалев В.Л., Погосбеян М.Ю. Анализ каталитических свойств теплозащитных покрытий β – кристоболита и SiC // Вестн. МГУ, сер. Математика и Механика, 2009, 2, 44-49.
6. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Прямое численное моделирование адсорбции водорода углеродными наноструктурами // Международный форум по нанотехнологиям, 3-5 декабря 2008, Москва.
7. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Моделирование адсорбции водорода в углеродных нанотрубках. // Известия РАН, МЖГ, 2009, 3, 160-164.

И.В. Купченко, А.А. Московский, А.В. Немухин

Московский государственный университет

Исследование механизма движения наномашин на основе карборанов

Недавно группой ученых из института Райс (США) были исследованы новые молекулярные наноустройства – наномшины (Vives, G.; Tour, J. M. *Acc. Chem. Res.* 2009, **42**, 473-487). Экспериментально было показано, что в движении наномашин определяющую роль играет вращение их колес. В связи с этим интерес представляет изучение взаимодействия колес с поверхностью. Наиболее перспективными являются наномшины, в которых в качестве колес используются *para*-карбораны (Khatua, S.; Guerrero, J. M.; Claytor, K.; Vives, G.; Kolomeisky, A. B.; Tour, J. M.; Link, *ACS Nano* 2009, **3**, 351-356) (Рис. 1а). Нашей задачей было теоретическое исследование движения этих молекул по поверхности стекла. В данной работе была изучена система, включающая молекулу *para*-карборана $C_2B_{10}H_{12}$ и фрагмент гидратированной поверхности кварца α - $SiO_2[1010]$ (Рис. 1б). Использовался метод теории функционала плотности с применением плоских волн (функционал BLYP, базис плоских волн TZVP с псевдопотенциалами GTN), были рассчитаны энергии адсорбции на трех адсорбционных сайтах. В результате была определена энергия адсорбции и описан наиболее вероятный механизм движения карборанового колеса по подложке.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований – проект 09-03-00388.

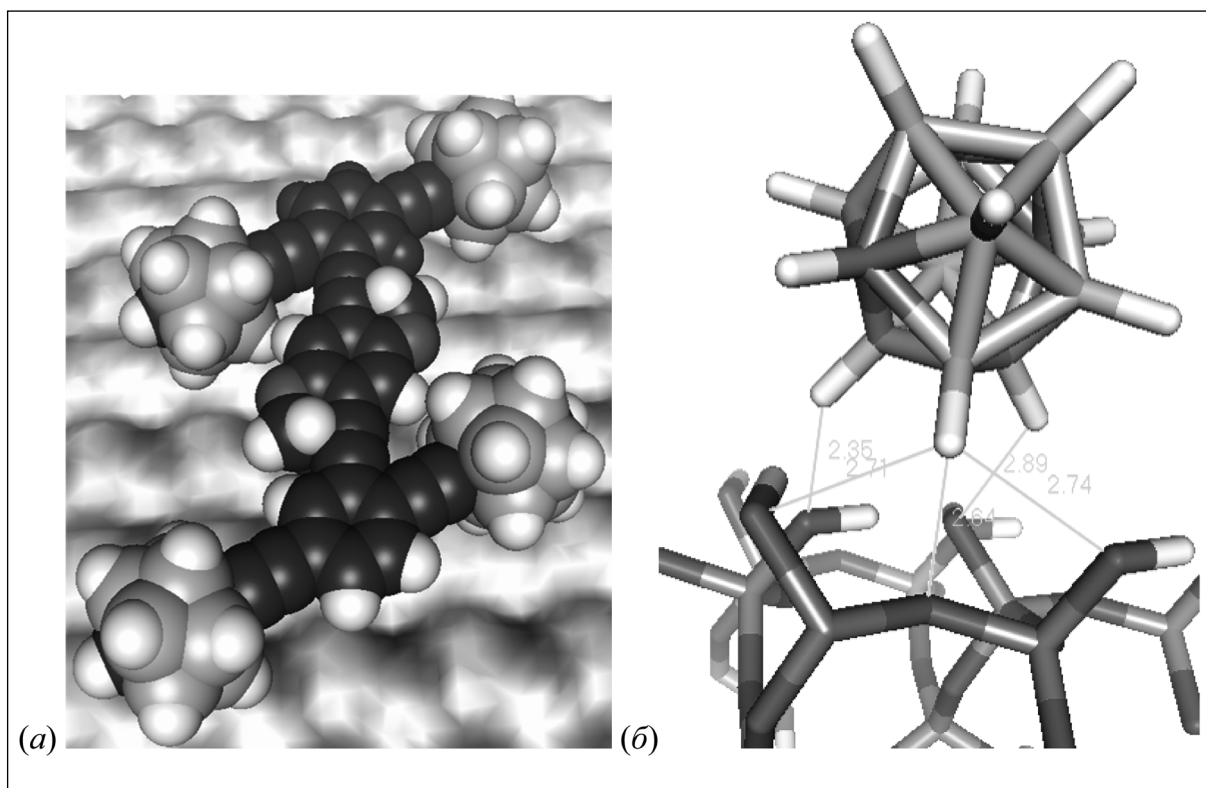


Рис. 1. Наномашина (а) и *para*-карборан (б) на поверхности кварца

Ю.Е. Лозовик

Институт спектроскопии РАН

Графен: загадка существования мембраны и необычные электронные свойства

В докладе обсуждаются необычные свойства недавно открытой наноструктуры – графена – и отрывающиеся перспективы его применения. Как известно, графит состоит из ван-дер-ваальсовски (т.е. относительно слабо) связанных двумерных плоскостей – графена с гексагональной структурой. Внутри графена связь сильная, гомеополярная, даже более сильная, чем в алмазе. Именно поэтому мы можем писать графитовыми стержнями, счищая чешуйки графита. Но три года назад было сделано неожиданное открытие: удалось экспериментально получить графен – одну единственную плоскость графита, с толщиной в один атом. Причем свободно подвешенный графен оказался стабильным относительно сворачивания в трубку или в комок.

Графен намного прочнее стали, его теплопроводность существенно выше, чем у меди. Но самое удивительное – его электронные свойства. Щель между валентной зоной и зоной проводимости у графена равна нулю, равны нулю и эффективные массы электронов и дырок. Это является следствием симметрии. В результате электроны и дырки эффективно описываются уравнением Дирака, но с массой равной нулю (как у нейтрино). Поэтому с фундаментальной точки зрения графен дает уникальную возможность продемонстрировать в лабораторных условиях нереализованные до сих пор эффекты квантовой электродинамики (точнее их аналоги).

В частности, это относится к парадоксу Клейна – возможности с единичной вероятностью преодолевать очень высокий энергетический барьер. В графене, рассеяние назад от не очень резкого, но очень высокого потенциального барьера запрещено, а вероятность прохождения через барьер равна 1. Это меняет влияние примесей в системе кардинальным образом. В частности, в графене, в отличие от всех других двумерных полупроводниковых слоев с примесями отсутствует слабая локализация Андерсона, что связано с существованием присущей электронам в графене топологической фазы Берри.

С другой стороны, графен перспективен для использования в нанотехнологии, например, как элемент нанотранзистора (база полевого транзистора с предельно малой толщиной в один атом).

В докладе, будет рассказана история открытия графена, последние теоретические и экспериментальные результаты и открывающиеся перспективы. В частности, будет кратко рассказана продолжавшаяся несколько десятилетий драматическая история, сомнений (связанных с расходимостями тепловых флуктуаций атомов не только вдоль плоскости графена, но и перпендикулярно к ней) в существовании сначала двумерного кристалла, а потом стабильной, свободно подвешенной мембраны.

Нами изучена система двух листов графена с независимо подсоединенными управляющими электродами. В этой системе предсказаны два эффекта. Во-первых, предсказано существование когерентной фазы и сверхтекучести в двухслойном графене, обусловленном спариванием пространственно разделенных электронов и дырок. Проанализирована роль топологической фазы Берри, возникающей в графене, на электрон-дырочное спаривание. Изучено влияние примесей на когерентное состояние в системе. Рассмотрены коллективные состояния в графене и нескольких листах графена. Во-вторых, предсказана бозе-конденсация и переход Костерлица-Таулесса для системы магнитоэкситонов в двухслойном графене в сильном поперечном магнитном поле. Рассмотрены две реализа-

ции для последнего случая – магнитоэкситоны, возникшие за счет приложения напряжения к управляющим электродам, либо созданные лазерной накачкой.

Изучена также когерентная фаза в системе нескольких листов графена. Изучена система поляритонов в системе с графеном. Обсуждается возможная сверхпроводимость графена. Указанные системы дают возможность создать работающие при достаточно высоких (вплоть до комнатных) температурах бездиссипативные элементы для передачи информации. Обсуждаются квантовые точки и нанотранзисторы на основе графена, а также наноэлектронные элементы принципиально нового типа. Рассматриваются расчеты наноэлементов на графене с помощью развиваемого нами обобщенного метода функционала плотности для систем с “ультрарелятивистским” электронным спектром.

Литература

1. Лозовик Ю.Е., Меркулова С.П., Соколик А.А. Коллективные явления в графене // УФН, 2008, **178** (7), 757-776.
2. Berman O.L., Lozovik Yu.E., Gumbs G. Bose-Einstein condensation and superfluidity of magnetoexcitons in bilayer grapheme // Phys. Rev., 2008, **В 77** (15), 155433.
3. Berman O.L., Kezerashvili R.Y., Lozovik Yu.E. Collective properties of magnetobixcitons in quantum wells and graphene superlattices // Phys.Rev., 2008, **В78** (3), 035135.
4. Berman O.L., Gumbs G., Lozovik Yu.E. Magnetoplasmons in layered graphene structures // Phys.Rev., 2008, **В 78** (8), 085401.
5. Berman O.L., Lozovik Yu.E., Snoke D.W. Theory of Bose-Einstein condensation and superfluidity of two-dimensional polaritons in an in-plane harmonic potential // Phys. Rev., **В 77** (15), 155317.
6. Lozovik Yu.E., Sokolik A.A. Electron-hole pair condensation in graphene bilayer // Письма в ЖЭТФ, 2008, **87** (1), 61-65.

В.В. Лучинин

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет

Время как фактор управления процессом структурообразования нанослоевых композиций, обладающих полиморфизмом

Известно, что особенностью сверхрешеток неорганической природы, период повторения последовательности слоев которых (пространственный период трансляции сверхрешетки) может варьироваться от единиц ангстрем до десятка нанометров, так же как и большинства биоорганических структур, склонных к полиморфизму, является то, что множество их структурно-устойчивых состояний характеризуется близкими свободными энергиями образования. Имеет место определенное энергетическое безразличие с точки зрения возникновения той или иной структуры.

Отметим, что политипизм (от греческого – «многочисленный отпечаток»), представляющийся еще сравнительно недавно для неорганической природы как специфическая структурная особенность ограниченного ряда веществ (карбид кремния, сульфид цинка, глинистые материалы), постепенно обнаруживается у все более широкого круга материалов. Причём, основными причинами возникновения различных политипов являются неравновесность процессов синтеза и структура субстрата, на котором происходит синтез.

Временные отношения — универсальный критерий управления процессами структурообразования.

Для открытых систем эволюция структуры есть результат неустойчивости, обусловленной потоками вещества и энергии от внешней среды. Реакцией на искусственно созданное неравновесное состояние является релаксация со спонтанным возникновением новых пространственно-временных структур. Для неравновесных систем, находящихся за пределами устойчивости, оставаясь в рамках классической термодинамической теории, невозможно предсказать возникновение определенного нового вида упорядоченности, поскольку эволюция системы происходит при наличии значительных внешних возмущений, связанных с процессами тепло- и массообмена. В рамках ранее сформулированных представлений можно предположить, что образовавшаяся структура имеет предел устойчивости по воспроизведению, когда ее матрица способна к самовосстановлению при генерации «ошибок» внешней средой. Если ошибка становится источником нового структурного кода, который определяет более устойчивую для данных условий синтеза структуру, должна происходить ее смена.

Поскольку каждой пространственной структуре, построение которой в вероятностной трактовке может быть рассмотрено с позиции проб и ошибок, присуще характерное время ее организации, то есть упорядочения (τ_i структурное), то в условиях движущей силы упорядочения F_i , подвижности процессов упорядочения μ_i и характеристического пространственного периода структуры λ_i , она воспроизводится, если время потери подвижности частиц (τ_s) в результате их встраивания в растущий объем больше необходимого времени упорядочения:

$$\tau_i = \frac{\lambda_i}{\mu_i F}, \tau_i < \tau_s$$

При обратном знаке неравенства получаем критерий смены исходной пространственной структуры с образованием структур с меньшим периодом трансляции. Таким образом, *условием разрушения (изменения) исходной пространственной периодичности структуры является меньшее значение реализуемого времени упорядочения, определяемого скоростью синтеза по сравнению с необходимым для аккомодации в требуемую структуру.*

Неравновесный термодинамический подход к процессам структурообразования.

Больцмановский принцип упорядочения недостаточен для понимания механизма образования дальнего порядка в веществах, способных к существованию в виде множества структурно устойчивых состояний, между которыми разница в свободных энергиях и энтропиях незначительна.

Поэтому данный раздел посвящен термодинамическому анализу проблемы упорядочения сверхструктур в условиях открытой неравновесной системы.

Для открытых систем в результате неустойчивости, обусловленной потоками вещества и энергии от внешней среды, возникает временная эволюция системы. Это требует введения в фундаментальное уравнение параметра «времени». Поэтому в неравновесной термодинамике вводится параметр полного производства энтропии, складывающегося из производства энтропии внутри системы — $d_i S/dt$, и его компоненты, обусловленной обменом с внешней средой — $d_e S/dt$:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{d_i S}{dt} + \frac{d_e S}{dt}$$

Из вариационного принципа, основанного на минимизации производства энтропии внутри системы в стационарном состоянии, предложенного И. Пригожиным для открытых систем, вытекает, что основным параметром, характеризующим необратимые процессы, следует считать не энергию, а производство энтропии.

Производство энтропии достигает в стационарных условиях своего минимального значения. При этом избыточная энтропия в стационарном режиме роста индивида и $\Delta S'_{изб.j}$, рассчитанная на единицу площади поверхности, определяется исходя из баланса интенсивности производства энтропии dS/dt , являющегося следствием неравновесности роста и интенсивности стока энтропии, вызванного процессами упорядочения в потенциальных полях растущего индивида и протекающего за время упорядочения τ_{yn} :

$$\frac{dS}{dt} = \frac{\Delta S'_{изб.j}}{\tau_{yn}}$$

Последняя формула является следствием стационарности процесса упорядочения и, как уже отмечалось, выражает баланс между интенсивностью производства энтропии внутри системы и интенсивностью ее экспорта. Поскольку величина производства энтропии, являясь результатом необратимости процесса кристаллизации, одинакова при образовании различных структурно устойчивых состояний, имеющих равный химический потенциал, то избыточная энтропия данной структурной модификации j (при заданных условиях синтеза) определяется, исходя из значения суммарного времени релаксации процесса упорядочения — временем упорядочения определенной структуры j :

$$\tau_{yn.cmp.j} = \frac{\sum \tau_{рел.l}}{l}$$

где $\sum \tau_{рел.l}$ — время релаксации l -го процесса. На данном этапе на основе экспериментальных исследований и оценки времени упорядочения естественных сверхструктур карбида кремния, протяженностью от единиц до десятков нм в рамках рассмотренной неравновесной термодинамической модели было показано, что для веществ, имеющих малые различия в свободных энергиях образования структур и высокие потенциальные барьеры между ними при ростовом кинетическом переходе в определенную структуру, выполняется постоянство критической избыточной энтропии, независимо от исходной структуры, а возрастание ее значения определяет эволюцию структуры в направлении уменьшения кратчайшего пространственного периода трансляции. Таким образом, в рамках данного раздела показано, что возникновение в неравновесных условиях определенного вида структурной упорядоченности следует рассматривать как кинетический фазовый переход в форме адаптивного матричного синтеза с сопряженным протеканием двух процессов: матричного копирования (репликации), то есть упорядочения в потенциальных полях матрицы — субстрата при гетерогенном синтезе; самоструктурирования в открытой системе с доминированием в качестве базовых переменных и критериев структурной селекции временных характеристик процесса упорядочения.

Г.Г. Малинецкий

Институт прикладной математики РАН

Проектирование будущего. Роль нанотехнологий в новой реальности

В докладе представлена одна из ключевых технологий, направленных на поддержание развития и суверенитета государств в XXI веке – алгоритмы проектирования будущего

го. Эффективность и результат усилий, предпринимаемых сегодня в сфере экономики, обороны, науки, образования, международных отношений, кардинально зависит от того, насколько мы представляем динамику мировой системы и возможные сценарии развития России на ближайшие 30 лет. Современный системный анализ и компьютерное моделирование позволяют существенно продвинуться в понимании будущего, которое может сыграть важную роль в выборе желательного варианта грядущего. Интересные результаты в этом направлении были получены в рамках проекта «Комплексный системный анализ и математическое моделирование мировой динамики», выполняемого по программе фундаментальных исследований Президиума РАН в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН [1].

В этом контексте цели, смысл и направления развития нанотехнологического проекта приобретают особое значение. В 2014-18 гг., вероятно, произойдет переход от V к VI технологическому укладу. Локомотивными отраслями последнего, видимо, станут нано- и биотехнологии, новая медицина, алгоритмы более эффективного развития возможностей человека и коллективов, новое природопользование, роботика. От того, в какой мере Россия сможет воспользоваться возможностями этого технологического уклада, зависит не только перспектива, но и само существование нашего общества.

1. Прогноз и моделирование кризисов и мировой динамики/ Будущая Россия/, Ред. А.А.Акаев, А.В.Коротаев, Г.Г.Малинецкий, М.: ЛКИ, 2010, 352 с.

Ю.В. Новаковская

Московский государственный университет, химфак

Моделирование кластеров как основа для описания свойств наносистем

Появляется все больше экспериментальных работ, описывающих практически важные спектральные свойства синтезированных структур наноразмера, а также их тепло- и электропроводность. При оценке подобных характеристик обычно применимы континуальные модели. Одновременно эксперименты выявляют интересные и подчас неожиданные свойства наноструктур, помещенных в электромагнитные поля или облучаемых светом или потоками заряженных частиц (в основном электронов или протонов). В последнем случае весьма вероятной оказывается ионизация, условия и продукты которой соответствуют не вертикальному (мгновенному), а адиабатическому или неадиабатическому (сопровождающемуся релаксацией ядерной подсистемы соответственно без изменения или при изменении электронного состояния системы в целом) превращению. О механизме даже адиабатического процесса невозможно судить на основании каких-либо континуальных моделей, ибо необходима информация о реорганизации ядерной подсистемы. В случае же неадиабатического процесса необходимы, помимо этого, данные о системе в различных электронных состояниях и о вероятностях перехода между этими состояниями.

Всю эту информацию можно получить лишь в квантовохимических расчетах интересных систем. Но даже при доступе к суперкомпьютерам такие расчеты требуют очень больших затрат и времени, и мощностей, а в ряде случаев практически нереализуемы. Все эти факторы чрезвычайно затрудняют не только предсказание вероятных свойств новых наносистем, но и описание поведения уже изученных экспериментально.

Один из путей решения этой проблемы предложен в наших работах. Он применим к ограниченному, хотя и довольно большому кругу систем, удовлетворяющих одному важному требованию: при увеличении размера системы (в выбранных пределах) не происходит радикального изменения электронного строения. Под радикальным понимается качественный скачок, например, характерный для кластеров щелочных металлов, которые, начиная с определенного размера ведут себя подобно макроскопическим образцам металлов, когда щель их запрещенной зоны становится бесконечно малой. Как показывают и эксперимент, и теория, при наноразмерах у значительной части систем еще не проявляются свойства, типичные для макрообъектов, а потому сформулированное выше требование выполнено.

Предложенный подход основан на изучении закономерностей изменения интересующих свойств кластерных систем QR_n , состоящих из небольшого числа n (от нескольких единиц до двух—трех десятков) структурных единиц R (в качестве которых могут выступать атомы, молекулы или небольшие их ассоциаты) и включающих инородный фрагмент Q , при увеличении n и экстраполяция построенных зависимостей к $n = 10^4 \dots 10^6$. При небольших значениях n кластеры можно изучать методами квантовой химии, используя соответствующие приближения (более или менее высокого уровня). Детальный анализ электронно-ядерных состояний этих кластеров формирует базу для построения теоретической модели, на основании которой далее численно обрабатываются результаты расчетов небольших систем.

Хорошей иллюстрацией предложенного метода является оценка условий ионизации или связывания избыточных электронов системами, представляющими собой структурные фрагменты макроскопических растворов различных частиц в воде, т.е. фактически гидраты определенного состава. Такой выбор систем определен рядом факторов.

Во-первых, нано- и микросистемы такого типа проявляют интересные свойства. Достаточно упомянуть отталкивание одноименно заряженных капель воды и реализацию химических реакций между отдельными молекулами реагентов, когда последние заключены в незаряженные капли воды. Одновременно, разрабатываются устройства, в основе функционирования которых лежат свойства жидкой воды или льда. В качестве примеров можно привести модель химического компьютера, основанного на кристаллизации тригидрата ацетата натрия, и метод передачи информации в воде посредством ее ионизации лазером, ведущей к формированию акустических волн. Наконец, существует множество процессов, реализуемых в молекулярных пучках, продукты и механизмы которых радикально изменяются при изменении концентрации инородных частиц в кластерах воды. Таким образом, во всем диапазоне размеров, от небольших кластеров до макрообъектов, водные системы демонстрируют свойства, позволяющие разрабатывать на их основе перспективные технологии.

Во-вторых, как показывают наши квантовые расчеты, начиная с $n \sim 10$, когда в кластерах доминируют трех- и четырехкоординированные молекулы воды, распределение электронной плотности системы может быть представлено суперпозицией электронных плотностей отдельных молекул воды и инородной частицы (либо индивидуальной, либо окруженной несколькими молекулами, формирующими ее первую гидратную сферу). Это позволяет строить теоретические модели для оценки таких свойств данных систем, которые обусловлены перераспределением электронной плотности. Более того, обоснована возможность экстраполяции этих свойств отдельных кластеров не только на нано-, но и на макрообъекты.

Например, анализ распределения разностной электронной плотности модельных фрагментов сетки водородных связей воды (индивидуальной или сольватирующей ионы щелочных металлов) при наличии и в отсутствие дополнительного электрона позволил построить электростатическую модель связывания дополнительного электрона системой

распределенных мультиполей и предложить аналитическую зависимость энергии локализации электрона от числа молекул воды в анализируемом фрагменте. Аппроксимация рассчитанных энергий отрыва электрона от соответствующих анионных или нейтральных кластеров позволила получить оценки фотоэлектрического порога жидкой воды, энергии гидратации электрона и потенциалов электродных полуреакций окисления щелочных металлов в воде, которые весьма хорошо согласуются с соответствующими экспериментальными величинами. Помимо этого, указанные величины были оценены и для наносистем произвольных размеров.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 08-03-01042).

Г.Э. Норман

Объединенный институт высоких температур РАН

Метод классической молекулярной динамики: вклад в основания статистической физики

Рассматривается вопрос: какое место занимает метод молекулярной динамики в системе основных понятий статистической физики и физической кинетики, изложенных в курсе Ландау и Лифшица, и где он дополняет этот курс, а где даже исправляет некоторые исходные положения.

Лекция посвящена принципиальным основам классического метода молекулярной динамики, зародившегося полвека тому назад как вычислительное средство решения задач статистической физики и ставшего к настоящему времени одним из важнейших численных методов в теории конденсированного состояния. В то же время метод молекулярной динамики, основанный на решении уравнений движения системы многих частиц, оказался непосредственно связан с базовыми представлениями классической статистической физики, в частности, с проблемой возникновения необратимости.

В лекции проанализированы динамические и стохастические свойства молекулярно-динамических систем, связанные с локальной неустойчивостью траекторий и погрешностями численного интегрирования. Рассматривается теория метода молекулярной динамики: ляпуновская экспоненциальная расходимость траекторий, время динамической памяти, малые, но конечные флуктуации полной энергии, негамильтоновость метода молекулярной динамики, статистический смысл усреднения по траекториям, возникновение необратимости. Проблемы метода молекулярной динамики сопоставляются с задачей динамического хаоса. Обсуждается природа вероятностного характера классической статистики. Предложена концепция, объясняющая конечное время динамической памяти и возникновение необратимости в реальных системах на основе молекулярно-динамических расчетов с учетом реальных физических факторов.

Рассмотрен вызов, который метод молекулярной динамики бросил устоявшимся представлениями классической статистической физики. Проанализирована модель вещества, которая на самом деле исследуется в методе молекулярной динамики. Сделана попытка сформулировать новую парадигму (классической) статистической физики, следующую из результатов метода молекулярной динамики.

Г.Э. Норман

Объединенный институт высоких температур РАН

Моделирование релаксации неравновесных сред методами классической молекулярной динамики

Метод классической молекулярной динамики – это метод, в котором для описания свойств систем многих взаимодействующих друг с другом атомов составляется и численно интегрируется система уравнений движения Ньютона. Искомые свойства и характеристики системы находятся из анализа и обработки найденных траекторий атомов. В лекции сформулированы стандарты требований к моделированию равновесных систем и процессов релаксации (выбор числа атомов, начальных и граничных условий, способы диагностики и др.).

В качестве приложений представлены примеры моделирования (modeling and simulation) как равновесных, так и метастабильных систем. Представлены уравнение состояния и коэффициенты переноса, фазовые равновесия, границы устойчивости (спинодаль) метастабильных кристаллов и жидкостей, фазовая диаграмма в области отрицательных давлений, структура поверхности, флуктуации, плазменные волны и ограничение возбужденных состояний атомов в неидеальной плазме и др.

Основное внимание уделено моделированию релаксационных процессов. Рассмотрены гомогенная нуклеация при перегреве и/или растяжении кристаллов, гомогенная кавитация при растяжении жидкостей, небульцмановская (неэкспоненциальная) релаксация и установление распределения Максвелла в неидеальной плазме, структурные превращения, механизмы пластической деформации и разрушения кристаллических твердых тел при высокоскоростном растяжении, откольная прочность, ударные волны и др. Значительное внимание уделено металлам.

Кратко обсуждаются многоуровневые подходы, которые позволили бы, опираясь на результаты метода молекулярной динамики, выйти за рамки пространственных и временных масштабов, доступных методу молекулярной динамики, вплоть до макромасштабов. Затронуты вычислительные средства и методы вычислений.

И.Ю. Попов, С.А. Чивилихин, В.В. Гусаров

С.-Петербургский университет информационных технологий, механики и оптики
С.-Петербургский технологический институт

Модель течения структурированной жидкости через нанотрубку

Исследовано влияние структуры жидкости в нанотрубке на характер ее течения. Граничные условия на стенке нанотрубки получены на основании квантово-механического расчета. Рассмотрено течение жидкости, вызванное солитоном, распространяющимся по стене нанотрубки.

Модель массопереноса жидкости в нанотрубке, предлагаемая в настоящей работе, основана на учете наличия в ней наноразмерных кристаллических кластеров (кристаллитов) [1]. В работе оценивается величина эффективной вязкости μ_{eff} жидкости в нанотрубке, которую определяется следующим образом. Установим соответствие нанотрубки, заполненной жидкостью, и возможно, содержащей кристаллиты, с трубкой, того же размера и с тем же перепадом давлений и расходом, в которой реализуется течение Пуазейля, рассматриваемой как гомогенная среда, т.е. жидкости, без учета ее кристаллитного строения. Вязкость течения Пуазейля, которая обеспечивает совпадение указанных параметров, мы и назовем эффективной вязкостью течения в нанотрубке.

Мы используем квантово-механическое рассмотрение для получения граничного условия на внутренней поверхности нанотрубки

$$v_x|_s - v_s = L_s \left. \frac{\partial v_x}{\partial n} \right|_s,$$

где

$$v_w = \frac{\int \frac{p}{m} W dp}{\int W dp}$$

и

$$L_s = \frac{a}{\tau \int W dp}$$

- это скорость проскальзывания и длина проскальзывания соответственно, p и m – импульс и масса молекулы жидкости, a и τ – среднее расстояние и среднее время перехода между двумя равновесными положениями молекулы жидкости, $W dp$ – вероятность перехода (в единицу времени) из свободного состояния в жидкости в связанное состояние на стенке.

Расчет течения производится на основе энергетических оценок. Характер течения в нанотрубке зависит от соотношения между равновесным размером кристаллита и диаметром нанотрубки. Рассчитанное поведение эффективной вязкости жидкости в зависимости от диаметра трубки качественно согласуется с результатами ряда работ, в которых экспериментально было показано, что для трубок с внутренним диаметром, имеющим нанометровые размеры, может наблюдаться аномальное увеличение скорости массопереноса воды [2]. Вместе с тем, возможно и резкое увеличение эффективной вязкости воды при уменьшении размера канала до нанометровых значений [3]. Для тонких нанотрубок с упругими стенками предложена модель, учитывающая влияние солитона, распространяющегося по стенке трубки, на течение. Следует отметить, что альтернативную трактовку аномальному повышению скорости транспорта в квазиодномерных каналах можно дать на основании [4].

Литература

1. Френкель Я.И. // УФН, 1941, **25** (1), 1-18.
2. Jason K.H., Hyung G.P., Yinmin W., Stadermann M., Artyukhin A.B., Grigoropoulos C.P., Noy A., Bakajin O. // Science, 2007, **312**, 1034 – 1037E.
3. Li T.D., Gao J., Szożkiewicz R., Landman U., Riedo E. // Phys. Rev. B., 2007, **75**, 115415.
4. Маслов В.П. // ТМФ, 2007, **153** (3), 388-408.

Ю.И. Сезонов, П.А. Эминов, А.А. Ульдин

Московский институт электроники и математики

Модель электронного газа на цилиндрической поверхности для описания диэлектрических свойств нанотрубок

Открытие новых форм углеродных соединений, сначала фуллеренов, а затем нанотрубок, являясь одним из самых значительных достижений науки конца XX века, привело к интенсивному экспериментальному и теоретическому исследованию физических свойств нанотрубок. Геометрия однослойной нанотрубки близка к цилиндру, а простейшая модель нанотрубки – это квантовый цилиндр, на поверхности которого находится электронный газ. Электронный газ движется по поверхности образованной положительными ионами, что соответствует твердотельной плазме. Для физики наноструктур принципиальный интерес представляют вопросы распространения и излучения электромагнитных волн, образование плазменных волн, их дисперсия и затухание. В докладе представлены результаты работ [1, 2, 3]. Основная цель проведенных исследований – изучение квантовых эффектов индуцированных постоянным магнитным полем.

Энергетический спектр нерелятивистского электрона на цилиндрической поверхности в постоянном магнитном поле, направленном вдоль оси цилиндра, зависит от азимутального квантового числа, определяющего энергию поперечного движения, продольного импульса и параметра Ааронова-Бома равного числу квантов магнитного поля через сечение структуры.

Для изучения диэлектрических свойств нанотрубки вычислена статистическая матрица плотности нерелятивистского электронного газа, находящегося на цилиндрической поверхности в присутствии магнитного и электрического полей. Магнитное поле направлено вдоль оси цилиндра и учтено точно, а электрическое – по теории возмущений в линейном приближении.

На основе полученного результата выведена квантовая формула, описывающая зависимость продольной диэлектрической проницаемости электронного газа от характерных параметров задачи, в том числе от радиуса нанотрубки и напряженности магнитного поля. Это позволило впервые дать полное описание как явления временной, так и явления пространственной дисперсии. Получены асимптотики закона дисперсии продольных плазменных волн для вырожденного электронного газа в случаях слабой и сильной пространственной дисперсии. Для статического случая, когда особенно ясно видна роль пространственной дисперсии в плазме, диэлектрическая проницаемость имеет особенность, аналогичную коновской в трехмерном случае. Характерно, что в двумерной плазме наблюдаются осцилляционные зависимости продольной диэлектрической проницаемости от параметра Ааронова – Бома и от радиуса нанотрубки.

Продольная диэлектрическая проницаемость является комплексной величиной, мнимая часть которой отвечает за затухание. Можно выделить три типа затухания плазменных волн. Это – диссипативное затухание, связанное с рассеянием электронов на примесях и фононах, радиационное затухание, связанное с излучением фотонов, и затухание Ландау. Затухание Ландау – бесстолкновительная диссипация энергии в плазме, которая возникает, когда скорость электронов в направлении распространения волны совпадает с фазовой скоростью волны.

Затухание Ландау в случае больцмановского и вырожденного электронного газа зависит от параметра Ааронова – Бома и от радиуса цилиндра.

Литература

1. Эминов П.А., Перепелкина Ю.В., Сезонов Ю.И. Диэлектрические свойства намагниченного электронного газа нанотрубки// ФТТ, 2008, **50** (12), 2220-2224.
2. Сезонов Ю.И. Макроскопические квантовые эффекты в намагниченных нанотрубках. // СПб.: Известия РГПУ им. А.И. Герцена, Естественные и технические науки: Физика, 2009, **11**, 89-100.
3. Сезонов Ю.И., Перепелкина Ю.В. Влияние внешнего магнитного поля на затухание Ландау в углеродных нанотрубках// Химическая физика, 2009, **28**(4), 81-84.

В.В. Смирнов, Л.И. Маневич

Институт химической физики РАН

Механизм локализации энергии в нелинейных цепях и рождение хаотических бризеров

В работе рассматривается механизм локализации энергии в дискретных нелинейных решетках. Показано, что явление локализации является следствием взаимодействия неустойчивой пилообразной моды, соответствующей максимальному собственному значению линейной задачи, и ближайшей по частоте высокочастотной моды. Такой механизм является общим для систем с различным числом степеней свободы – от коротких замкнутых молекул типа бензольного кольца до длинных цепей линейных полимеров. Полученные уравнения описывают динамику нелинейных нормальных мод и допускают очень наглядную интерпретацию в терминах предельной фазовой траектории (ПФТ). Такой подход позволяет определить порог неустойчивости верхней пилообразной моды, приводящей к рождению хаотических бризеров, в зависимости от числа частиц. Амплитуда нормальной моды, соответствующая порогу локализации оказывается равной $\square^2/3N\square$, где $\square$ – параметр нелинейности, N – число частиц. Как показывают данные компьютерного моделирования, хаотические бризеры, рождающиеся выше порога неустойчивости, являются короткоживущими локализованными возбуждениями. Однако, настоящий порог локализации энергии оказывается почти вдвое выше и равен $16\square^2/27N\square$. Выше этого порога энергия оказывается «запертой» в одной из половин цепи, причем для описания такой локализации вполне достаточно двух высокочастотных нормальных мод. Истинный профиль локализованного решения формируется добавлением более низкочастотных компонент, которые, хотя и содержат очень небольшую часть энергии возбуждения, существенно сказываются на пространственном профиле решения. Процесс формирования локализованного решения очень наглядно интерпретируется в терминах ПФТ и в этих же терминах становится очевидным происхождение внутренней «дыхательной» моды бризеров, выражающейся в периодическом изменении ширины и высоты бризера. Полученные результаты позволяют проследить происхождение локализованных возбуждений от малых систем к большим.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 08-03-00420-а)

В.В. Стегайлов

Объединенный институт высоких температур РАН
Московский физико-технический институт

Моделирование наноструктур методами квантовой молекулярной динамики

Интенсивное совершенствование на протяжении последних десятилетий теоретических и вычислительных методов описания физико-химических процессов на наномасштабах обеспечивает фундаментальную методическую основу средств анализа и предсказания, необходимых для развития нанотехнологий. Одновременный непрерывный взрывной рост производительности компьютерной техники предоставляет уникальные возможности по моделированию наносистем на беспрецедентном ранее уровне точности, позволяющем формулировать и решать задачи инженерно-технологического уровня в различных областях нанотехнологий.

В 50-х годах 20 века в результате создания компьютеров появился способ проведения больших объемов математических расчетов. Одним из первых применений этих немислимых ранее вычислительных возможностей стали задачи равновесной и неравновесной статистической механики, решение которых предполагалось получать путем непосредственного расчета динамики многочастичной системы на основе классических уравнений движения. Первыми моделями были система нескольких сотен твердых сфер и система нескольких сотен атомов, взаимодействующих по потенциалу Леннарда-Джонса. Подобный метод решения задач равновесной и неравновесной статистической механики получил название метода молекулярной динамики (МД).

Метод МД в своих главных чертах был разработан к концу 80-х годов. В настоящее время метод МД используется для исследования задач физики конденсированного состояния, физики поверхности, неидеальной плазмы, биофизики. Метод МД особенно важен как основа атомистического и молекулярного моделирования для задач нанотехнологий. МД модели различаются по уровню точности описания потенциалов межатомного взаимодействия. В начале лекции будет кратко рассказано об области применимости классических моделей потенциалов межатомного взаимодействия. Описано развитие методов расчета электронной структуры вещества (методы основанные на приближении Хартри-Фока, метод функционала электронной плотности). Далее речь идет о приближении Кара-Парринелло, которое открыло эру интенсивного приложения метода МД к различным задачам, требующим явного учета электронной структуры и/или повышенной точности описания потенциалов межатомного взаимодействия.

Актуальной современной проблемой развития методов квантовой МД является описание возбужденных состояний и атомной динамики за рамками адиабатического приближения. В качестве одного примера рассматривается ограниченный метод Кона-Шэма с открытыми оболочками, совмещенный с моделью Тулли для описания перескоков между поверхностями потенциальной энергии. Другим примером служит конечно-температурная формулировка теории функционала плотности.

В лекции затронут вопрос высокопроизводительных вычислений на суперкомпьютерах применительно к задачам квантовой МД. Рассказано о существующих программных средствах и предельно достижимых для прямого моделирования пространственных и временных масштабах. Одним из средств преодоления масштабных ограничений является создание квантово-классических моделей, примеры которых приведены в лекции. Обсуждаются приложения квантовой МД к задачам безизлучательной релаксации фотовозбу-

жденных молекул, исследованию взаимодействия электролита с графитовыми нанопорами в перспективных суперконденсаторах, описанию отклика поверхности на фемтосекундные энерговыкладки большой мощности при наноструктурной обработке.

А.В. Хахалин

Московский государственный университет, физфак

Структура водородных связей в водных кластерах

Теоретически установленный (теории структурных дефектов Самойлова, структур Бернара-Фалуера, мерцающих кластеров Франка и Вена и др.) и экспериментально подтвержденный факт гетерогенности воды [1] актуализирует вопрос о природе ее неоднородности. Одну из главных ролей в ней играет льдоподобная вода, определяя центры образования кристаллической структуры при ее замерзании.

Считается, что кристаллизация воды начинается из мест сосредоточения ее примесных частиц. Абсолютно чистая лабораторная вода центров кристаллизации имеет значительно меньше, чем вода, находящаяся в естественных водоемах. Поэтому она может переохлаждаться, оставаясь в жидком состоянии даже при отрицательных температурах (при нормальном атмосферном давлении).

Примеси в воде приводят к появлению дефектов в ее структуре сетки водородных связей. В настоящее время, отсутствуют экспериментальные методики определения водородной связи и характеристик ее динамики в водных средах. Подобные исследования можно проводить только методами численного моделирования.

В данной работе, для изучения структуры сетки из водородных связей между молекулами воды под воздействием температуры (1 или 300 К) и примесей (катионы Na^+ или K^+) были выбраны следующие 3 водных кластера: $(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ и $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, где $2 \leq n \leq 8$. Молекулы H_2O описывались в рамках жесткой модели воды. Для расчетов межмолекулярных взаимодействий молекул воды друг с другом и с катионом Na^+ или K^+ использовались атом-атомные потенциальные функции Полтева-Маленкова [2, 3]. В расчетах использовался жестко детерминированный начальными условиями генератор случайных чисел двойной точности «ran2» [4]. Моделирование процесса гидратации осуществлялось посредством генерирования равновесных при температуре 1 или 300 К конфигураций из молекул воды, взаимодействующих друг с другом и с гидратируемым катионом Na^+ или K^+ . Их получение производилось методом Монте-Карло с процедурой Метрополиса [5] при периодических граничных условиях (расчетная ячейка представляла собой куб с длиной стороны 40 Å). Из последовательно получаемых равновесных при температуре 1 или 300 К конфигураций каждого кластера с шагом 1000 формировалась 10000 выборка. Из 20 таких выборок образовывался набор. На основании анализа в этом наборе значений количеств равновесных конфигураций, соответствующих оригинальным типам структур сеток из водородных связей, определялись их средние весовые коэффициенты и ошибки их определения с доверительным интервалом 0,95. Тип структуры с наибольшим весовым коэффициентом, встречающимся во всех 20 выборках в наборе, назывался наиболее вероятным типом. Под структурной характеристикой сетки из водородных связей подразумевается набор водородо-связанных геометрических фигур, каждая из которых является связанным ориентированным (ребро направлено от кислорода, являющегося донором протона к кислороду – акцептору) графом, вершинами которого являются атомы кисло-

рода, а ребрами – водородные связи между молекулами воды. Анализ структур сетки водородных связей равновесных конфигураций водного кластера с катионом осуществлялся по формализованным признакам, основанным на теории графов [6]. Данная методика не позволяет учесть только хиральность водородо-связанных фигур из молекул воды.

В результате численного моделирования, в каждом из 3-х исследованных кластеров выявлены все разновидности образуемых типов структур сеток водородных связей, а также наиболее вероятные при температуре 1 или 300 К типы таких структур. Установлено, что при 1 К наиболее вероятный тип структуры сетки из водородных связей между n молекулами воды каждого из 3-х кластеров образуется на основе наиболее вероятного типа при $n-1$ (с точностью до одной водородной связи). При температуре 300 К такая зависимость образования наиболее вероятного типа структур сетки из водородных связей для каждого из 3-х кластеров сохраняется. Однако только равновесные конфигурации кластера $(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятным типам структур при температуре 300 К состояли из разбросанных по всему объему расчетной ячейки одиночных молекул H_2O и водородо-связанных групп (состоящих до 3-х молекул воды). В равновесных конфигурациях водных кластеров с примесной частицей Na^+ или K^+ соответствующих наиболее вероятным типам структур сеток из водородных связей, молекулы воды сосредоточены вблизи примесной частицы (в сфере радиусом не более 3 ПКС).

На основании полученных результатов, можно утверждать, что среди всего многообразия образуемых молекулами воды равновесных при температурах 1 и 300 К конфигураций существуют конфигурации с наиболее вероятными типами структур сеток из водородных связей. Эти типы структур зависят от следующих факторов: 1) количество молекул воды их образующих (наиболее вероятный тип структуры сетки водородных связей для кластера с n молекулами воды является развитием наиболее вероятного типа структуры, сформированного кластером с $n-1$ молекулами воды); 2) температура (с увеличением температуры количество водородных связей в наиболее вероятных типах структур уменьшается за счет эффекта испарения молекул воды); 3) присутствие примесей и их разновидность (наличие примесных частиц позволяет уменьшить эффект испарения молекул воды в равновесных конфигурациях с наиболее вероятными типами структур сеток из водородных связей, а разновидность примесной частицы влияет на разнообразие наиболее вероятных типов структур сеток из водородных связей в водных кластерах). Предположительно, первый и третий факторы могут определять существование в воде неоднородностей в виде кластеров, содержащих в себе большое количество молекул воды (~100 [1]).

Литература

1. Huang C., Wikfeldt K.T., Tokushima T., Nordlund D., Harada Y., Bergmann U., Niebuhr M., Weiss T.M., Horikawa Y., Leetmaa M., Ljungberg M.P., Takahashi O., Lenz A., Ojamäe L., Lyubartsev A.P., Shin S., Pettersson L.G.M., Nilsson A. The inhomogeneous structure of water at ambient conditions // Proceedings of the National Academy of Sciences; <http://www.pnas.org/content/early/2009/08/13/0904743106.abstract>
2. Poltev V.I., Grokhilina T.A., Malenkov G.G. Hydration of nucleic bases studied using novel potential functions // J. Biomolec. Struct. Dynam. 1984, **2**(2), 413-429.
3. Теплухин А.В., Маленков Г.Г., Полтев В.И. Атом-атомные потенциальные функции для моделирования взаимодействия ДНК с противоионами в водном растворе // Известия АН, Серия химическая, 1998, **11**, 2166-2173.
4. Vetterling W.T., Flannery B.P., Teukolsky S.A. Numerical Recipes in C // The Art of Scientific Computing, William H. Press, Cambridge University Press, 1992, 281-282.
5. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N., Teller A.H., Teller E. // J. Chem. Phys. 1953, **21**, 1087-1092.
6. Хахалин А.В., Теплухин А.В. Исследование сеток водородных связей в водных кластерах, содержащих ион Na^+ или K^+ // Биомедицинские технологии и радиоэлектроника, 2006, **1-2**, 70-74.