

III ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

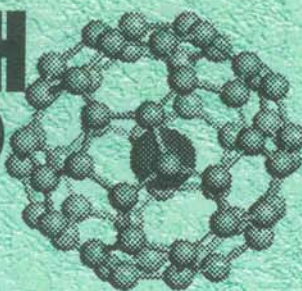
РНЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

ЦЕНТР ФОТОХИМИИ РАН

МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

МНОГОМАСШТАБНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ И СТРУКТУР
В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ

**ММПСи
2009**



27–29 мая 2009 года
МОСКВА

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РНЦ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

МОСКОВСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ)

II ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

МНОГОМАСШТАБНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПРОЦЕССОВ И СТРУКТУР
В НАНОТЕХНОЛОГИЯХ

Сборник тезисов докладов

Москва 2009

УДК 620.3(06)
ББК 32.847.8я5
В 85

II ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях». Сборник тезисов докладов.
М.: МИФИ, 2009. 492 с.

Настоящая книга является сборником трудов конференции ММПСН-2009, содержащим около трехсот тезисов докладов, предложенных специалистами из разных институтов и организаций России.

Работы отражают достижения и уровень исследований, тенденции и проблемы в области моделирования физических процессов, структур и материалов нанотехнологий.

Книга предназначена читателям, интересующимся тематикой представленных научных направлений.

Ответственный секретарь А.А. Тищенко

Статьи сборника издаются в авторской редакции

Материалы получены 20.12.2008

ISBN 978-5-7262-1152-7

© *Московский инженерно-физический институт
(государственный университет), 2009*

Подписано в печать 22.05.2009. Формат 60×84 1/16.
Печ. л. 30,75. Тираж 350 экз. Заказ № 235

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет)
Типография МИФИ
115409, Москва, Каширское ш., 31*

на основе стали Р6М5. Электронно-микроскопические исследования по методике угольных реплик и металлографический анализ, проведенный на микроскопе “Neophot-24” при различных увеличениях, дают четкую картину распределения этих структур и возможность непосредственного определения их распределения по объему материала. Анализ распределения содержания основных элементов W, Co, Fe, Cr, Mo, V при сканировании от поверхности покрытия вглубь материала показал, что в покрытии отсутствуют Fe, Cr и другие элементы. Малое количество Co локализовано в тонкой прослойке между слоем карбида вольфрама и быстрорежущей стали. Результаты измерения микротвердости (по Кнуппу) дополняют и детализируют картину структурных изменений в покрытии и основном материале Р6М5.

Важным результатом данной работы является определение оптимальных параметров контактного электрического взрыва твердого сплава для получения прочного износостойкого покрытия на поверхности быстрорежущей стали. Например, упрочнение данным методом режущей кромки зубьев дисковой пилы увеличивает в $2 \div 3$ раза износостойкость серийно изготавливаемой пилы при пилении заготовок древесно-стружечных плит по сравнению с необработанной серийной пилой.

Список литературы

1. Котов Ю. А., Иванов В. В. Порошковые нанотехнологии для создания функциональных материалов и устройств электрохимической энергетики. // Вестник Российской Академии Наук, т. 78, № 9, (2008), с. 777.
2. Григорьев Е.Г., Ульянова Т.Н. Структура поверхностных слоев стали Р6М5 при электроимпульсной обработке. // Научная сессия МИФИ-2005, т.9, с.96.

Ф.В. ГРИГОРЬЕВ^{1,2}, А.Н. РОМАНОВ^{1,2}, Д.Н. ЛАЙКОВ^{1,2},
С.Н. ЖАБИН^{1,2}, О. Ю. КУПЕРВАССЕР², А.Ю. ГОЛОВАЧЕВА²,
В.Б. СУЛИМОВ^{1,2}

¹ Научно-исследовательский вычислительный центр МГУ им. М. В. Ломоносова
² ООО «Димонта»

КОНСТРУКТОР СУПРАМОЛЕКУЛ: ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Эффективное использование методов молекулярного моделирования (ММ) способно в значительной мере сократить сроки разработки наноматериалов с заданными свойствами, а также снизить их стоимость. Как правило, к таким материалам предъявляются разнообразные требования по их структуре и свойствам, что обуславливает необходимость примене-

ния различных методов ММ. В настоящей работе мы представляем программный комплекс с рабочим названием Конструктор Супрамолекул (КС), в котором в рамках единой платформы реализованы следующие методы ММ, позволяющие рассчитывать различные характеристики наноструктур:

- Квантово-химический уровень моделирования [1], позволяющий из первых принципов (на основе решения многочастичного уравнения Шредингера) рассчитывать свойства нанокластеров (оптимальная геометрия, спектр поглощения, спектр люминесценции, дипольный момент, поляризуемость и др.) с числом атомов до нескольких сотен (зависит от уровня квантово-химического моделирования).

- Группа методов, основанных на применении классических силовых полей [2] для расчета энергии внутри – и межмолекулярного взаимодействия. Предусматривается локальная оптимизация нанокластеров с числом атомов ~10000, глобальная оптимизация комплексов типа «гость-хозяин» с использованием генетических алгоритмов [3] и расчет свободной энергии их образования с учетом энтропийного вклада по результатам молекулярно – динамического моделирования [4], возможность учета растворителя в рамках неявных моделей [5].

- Визуализация и редактирование структуры нанокластеров с помощью молекулярного редактора, интегрированного в КС и позволяющего сохранять информацию о структуре нанокластеров в форматах, используемых другими компонентами КС, а также распространенными внешними программами, имеющими сходную функциональность.

Апробацию КС предполагается провести при разработке оптических химических сенсоров, предназначенных для контроля концентрации в воздухе заданных химических веществ. Чувствительным элементом сенсора является супрамолекулярный рецепторный центр, который представляет собой молекулу-индикатор, спектр люминесценции которой изменяется при взаимодействии с детектируемой молекулой, а также ее ближайшее молекулярное окружение. Структура супрамолекулярного рецепторного центра выбирается так, чтобы оптимизировать взаимодействие молекулы-индикатора с детектируемой молекулой, повысить избирательность такого взаимодействия и усилить оптический отклик сконструированного рецепторного центра. Для решения этих задач необходимо использовать весь набор методов ММ, которые предполагается реализовать в КС.

Работа проводится в рамках контракта с ЦФ РАН (№ 02.523.11.3014-ДМ/08 от 25 августа 2008г.) по теме «Разработка программных средств многомасштабного моделирования и виртуального проектирования наноструктурированных материалов».

Список литературы

1. D. N. Laikov // Chemical Physics Letters V. 416 , P. 116–120 (2005).
2. T. A. Halgren // J. Comp. Chem. V. 5-6., P. 490-519. (1996).

3. А.Н.Романов, О.А.Кондакова, Ф.В.Григорьев, А.В.Сулимов, С.В.Лушекина, Я.Б.Мартынов, В.Б.Сулимов // Вычислительные методы и программирование. Т. 9, С. 213-233. (2008).
4. Ф.В.Григорьев, С.В.Лушекина, А.Н.Романов, В.Б.Сулимов, Е.А.Никитина // Биохимия. Т. 72, С. 963-973(2007).
5. A.N.Romanov, S.N.Jabin, Y.B.Martynov, A.V.Sulimov, F.V.Grigoriev, V.B.Sulimov // J. Phys. Chem. A (Letters). V. 108.,P. 9323-9328.(2004).

Б.Н. ГРУДИН, В.С. ПЛОТНИКОВ, Н.А. СМОЛЬЯНИНОВ,
С.В. ДОЛЖИКОВ, О.В. ВОЙТЕНКО, А.П. ГЛУХОВ
Дальневосточный государственный университет

ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ И ФИЛЬТРАЦИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ НАНОСТРУКТУР

Рассматриваются алгоритмы фрактального анализа и фильтрации изображений электронно-микроскопических изображений наноструктур на многих масштабах с использованием кратномасштабного анализа Фурье и скользящих окон. Предложенные алгоритмы реализованы в виде интерактивного программного комплекса, с помощью которого обрабатывались изображения наноструктур в аморфных и микрокристаллических сплавах. На электронно-микроскопических снимках сплавов визуализированы наноструктуры различных масштабов, и по соответствующим гистограммам определены их статистические и фрактальные характеристики.

Фрактальный анализ изображений наноструктур только на двух масштабах не дает возможности различить два фрактала, содержащих наноструктуры различных размеров. Самым простым выходом из этого положения является анализ на нескольких масштабах одновременно. Полученные ниже результаты позволяют утверждать, что такой анализ возможен с использованием предлагаемых в данной работе алгоритмов.

Для изображений стохастических фрактальных наноструктур спектральная плотность убывает по степенному закону в некотором диапазоне пространственных частот. Можно показать, что показатель степени для однородных изображений определяется логарифмом отношения энергий (дисперсий) на соседних пространственных частотах, отстоящих друг от друга, например, на октаву. Очевидно, что в пространственной области для фрактальных изображений логарифм отношения дисперсий изображений на двух соседних масштабах также должен сохраняться.

Определение границ справедливости этого факта осуществлялась нами по следующему алгоритму. Моделировалось изображение с заданной фрактальной спектральной плотностью. Менее детальное изображение получалось путем сглаживания смоделированного изображения скользящим окном размером (3*3) элемента нормированным для получения еди-

ча абсолютного уничтожения бактерий, вирусов и т.п., что не осуществимо современными фильтрами и абсорбентами. В этой системе фильтрации также применяются УФ-источники и излучение Солнца.

6. Телекоммуникации.

Создание фотонных кристаллов. Эта технология впервые была создана в нашей лаборатории в середине 80-х годов прошлого века.

7. Микро- и нанoeлектроника.

Нанолитография с разрешением в диапазоне 15-30нм.

8. Диагностика и метрология наноматериалов и наноустройств с использованием рентгеновской поликапиллярной оптики.

На базе поликапиллярной оптики в Институте рентгеновской оптики создано более 10 разных аналитических проборов (дифрактометры, μ XRF-спектрометры, рефлектометры, и т.д.), которые эффективно решают проблемы диагностики наноматериалов. Приборы портативны, потребляют мало энергии и обладают высокой функциональностью. Сейчас в мире насчитывается несколько тысяч приборов на базе поликапиллярной оптики. Во всех синхротронах последнего поколения используется метод 3D изображения объектов с помощью поликапиллярных линз.

9. Управление пучками высоких энергий.

Создание гамма-линз. Управление пучками протонов и ионов высокой энергии.

10. Фундаментальные проблемы.

В наноканалах поведение фотонов и частиц становится квантовым. Данное явление необходимо еще изучить.

О.Ю. КУПЕРВАССЕР^{1,2}, С.Н. ЖАБИН^{1,2}, В.Б. СУЛИМОВ^{1,2}

¹ Научно-Исследовательский Вычислительный Центр МГУ

им. М.В.Ломоносова, Москва

² ООО «Димонта», Москва

**КОНТИНУАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ РАСТВОРИТЕЛЯ.
ПОДСЧЕТ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ РАСТВОРЕНИЯ**

Доклад посвящен рассмотрению наиболее эффективных моделей растворителя. Рассмотрены три основных составляющих энергии сольватации. Подробно рассмотрена третья из них, связанная с электростатическим взаимодействием. Приведены три основных метода ее численного нахождения PCM, COSMO, SGB. Описаны их преимущества и недостатки.

Для подсчета свободной энергии растворения необходимо построить модель растворителя. Это можно сделать явно – путем рассмотрения рас-

творителя как набора большого числа молекул и моделировать взаимодействия между молекулами растворителя и молекулой растворенного вещества. Но этот метод при численном моделировании требует огромных затрат компьютерных ресурсов. Кроме того сложно подобрать верные модели взаимодействия молекул.

Поэтому более часто используются неявные модели растворителя, в которых растворитель рассматривается как непрерывная (континуальная) среда, а не дискретный набор молекул. В рамках континуальных (неявных) моделей растворителя предполагается, что при расчете свободной энергии растворяемой молекулы усреднение по всем координатам молекул растворителя произведено заранее.

Свободная энергия сольватации представляется в виде суммы трех составляющих:

1) Кавитационная или гидрофобная составляющая [1, 2] подсчитывается с использованием предложенной ранее схемы, в которой явным образом рассматривается эффект исключенного объема, обусловленный существованием в растворителе объема, занятого растворенным веществом и поэтому недоступным для растворителя

2) Часть взаимодействия, связанного с силами Ван-дер-Ваальса [3, 4]. Для расчета энергии взаимодействия Ван-дер-Ваальса субстрата с растворителем обычно используется простая формула, в которой энергия рассматривается как сумма энергий поверхностного натяжения молекулы, соответствующих различным сортам атомов.

3) Полярная составляющая. В приближении континуальной модели электростатическое взаимодействие молекулы с растворителем оценивается как взаимодействие точечных зарядов (а, точнее говоря, распределенный заряд, замененный набором точечных зарядов), расположенных внутри полости вырезанной в объеме однородного диэлектрика. Роль растворителя играет диэлектрик. Форма полости, вырезанной в нём, соответствует форме молекулы, с точностью до размера молекулы растворителя. Заряды в полости – описывают неравномерное распределение электронной плотности внутри молекулы. Обычно заряды располагают в центрах атомов, образующих растворяемую молекулу.

Мы сосредоточимся в данном докладе на третьей составляющей. Ниже рассмотрена точная постановка задачи о взаимодействии точечных зарядов внутри диэлектрической полости с диэлектриком. Согласно постановке, имеются две односвязные области пространства, разделённые замкнутой поверхностью. Внутренняя область имеет диэлектрическую проницаемость ϵ_{in} , а внешняя область проницаемость ϵ_{ex} . Во внутренней части расположена система зарядов, находящихся в центрах атомов. В результате взаимодействия зарядов с диэлектриком на границе раздела областей индуцируются поверхностный заряд. Состояние электростатического по-

ля определяется решением уравнения Пуассона [5, 6]. Для определения поверхностной плотности индуцированных зарядов необходимо решить интегральное уравнение. Полученные решения соответствуют континуальному приближению растворителя в задаче электростатического взаимодействия молекулы с растворителем.

Наиболее эффективные методы решения задачи о зарядах в диэлектрике:

- 1) Точные численные методы: PCM [5-8]
- 2) Приближенные численные методы: COSMO [9]
- 3) Эвристические методы: Surface Generalized Born (поверхностный обобщенный метод Борна). [10, 11]. Этот метод основан не только на выводах (точных или приближенных) из основных уравнений электродинамики, но также и на интуитивных «догадках» о характере решения.

Метод РСМ

Потенциал полностью и однозначно определяется как зарядами внутри полости, так и поверхностной плотностью заряда на стенках полости. Это позволяет свести задачу нахождения потенциала к гораздо более простой задаче нахождения поверхностного заряда полости. Такая задача требует для решения значительно меньше переменных и сходится гораздо быстрее, чем численное решение уравнения Пуассона в пространстве. При этом поверхностный заряд σ будет описываться интегральным уравнением.

Важную роль в реализации метода РСМ играет поверхность исключенного объема или в английской аббревиатуре SES (Solvent Excluded Surface). В нашей программе учета растворителя используется оригинальная поверхность исключенного объема, которая строится с помощью программы TAGSS [12, 13]. Для построения поверхности молекула субстрата все его атомы окружаются сферами радиуса Ван-дер-Ваальса, умноженные на 1.2. Для радиусов Ван-дер-Ваальса в литературе имеется различные наборы величин. Правильный выбор должен осуществляться на основе сравнения результатов «мокрого» эксперимента с результатами расчета. Этот фактор выбирается, чтобы предотвратить появление заряда субстрата на поверхности полости. Для получения гладкой поверхности, необходимой для сходимости метода, делается дальнейшая «обкатка» поверхности сферами малого радиуса. Затем производится триангуляция поверхности – разбиение на маленькие треугольники. Из этих треугольников в дальнейшем и формируются поверхностные элементы. Для ускорения РСМ может быть использован метод Абогьяна-Тоторова с увеличенными поверхностными элементами [7]

Приближенные численные методы – COSMO

Когда диэлектрическая проницаемость велика можно приближенно заменить диэлектрик проводником. На основе такой замены разработан

метод COSMO. Метод COSMO требует, как и PCM обращение матрицы, однако эта матрица симметрична, что облегчает нашу задачу, поскольку это вычислительно сделать легче. Этот метод особенно эффективен, когда в качестве растворителя используется вода, статическая диэлектрическая проницаемость которой при комнатной температуре равна 78.4.

Эвристические методы – Surface Generalized Born

В этом методе основные уравнения получаются не на основе вывода из точных уравнений, а на основе интуитивных догадок о характере решения.

В этом методе используется простая эвристическая формула для расчета энергии сольватации через Борновские радиусы атомов. Сами Борновские радиусы рассчитываются через поперечные интегралы, что и определяет первое слово в названии метода. GB метод позволяет очень быстро оценить свободную энергию.

Програмный продукт

Была написана программа основывающаяся на поверхности TAGSS и рассчитывающая энергию сольватации молекулы тремя методами: PCM, COSMO, SGB. Для молекулы около 50 атомов расчет этими тремя методами вместе длится около 20 секунд и дает ошибку менее 1 ккал/моль.

Работа проводится в рамках контракта с ЦФ РАН (№ 02.523.11.3014-ДМ/08 от 25 августа 2008г.) по теме «Разработка программных средств многомасштабного моделирования и виртуального проектирования наноструктурированных материалов».

Список литературы

1. Basilevsky, M.V. Excluded Volume Effect for Large and Small Solutes in Water. / M.V.Basilevsky, F.V.Grigoriev, I.V.Leontyev, V.B. Sulimov // J. Phys. Chem. A. – 2005. – V. 109. P. 6939-6946.
2. Grigoriev, F. V. Cavitation Free Energy for Organic Molecules Having Various Sizes and Shapes. / F.V.Grigoriev, M.V.Basilevsky, S.N.Gabin, A.N.Romanov, V.B.Sulimov // J. Phys. Chem. B. – 2007. – V. 111. P. 13748-13755.
3. Basilevsky, M.V. Computation of hydration free energies of organic solutes with an implicit water model. / M.V.Basilevsky, I.V.Leontyev, S.V.Luschekina, O.A.Kondakova, V.B. Sulimov // J. Comp. Chem. – 2006. – V. 27. P. 552-570
4. G.D. Hawkins, C.J. Cramer, D.G. Truhlar “Parametrized Models of Aqueous Free Energies of Solvation Based on Pairwise Descreening of Solute Atomic Charges from a Dielectric Medium” J. Phys. Chem. 1996, 100, 19824-19839
5. J. Tomasi, M. Persico “Molecular Interactions in Solution: An Overview of Method Based on Continuous Distributions of the Solvent” Chem. Rev. 1984, 94, 2027-2094
6. W. Im, D. Beglov, B. Roux “Continuum Solvation Model: computation of electrostatic forces from numerical solutions to the Poisson-Boltzmann equation” Computer Physics Communications 111 (1998), 59-75
7. Maxim Totrov, Ruben Abagyan, “Rapid Boundary Element Solvation Electrostatics Calculations in Folding Simulations: Successful Folding of a 23-Residue Peptide”, Biopolymers (Peptide Science), Vol. 60, 124–133 (2001)

8. B. Mennucci, J. Tomasi, "Continuum salvation models: A new approach to problem of solute's charge distribution and cavity boundaries", *J. Chem. Phys.*, 106 (12), 22 March 1997
9. B. Klamt, Schuurmann, "COSMO: A New Approach to Dielectric Screening in Solvent with Explicit Expressions for the Screening Energy and its Gradient", *J. Chem. Soc. Perkin Trans 2*, 1993
10. Alexey N. Romanov, Sergey N. Jabin, Yaroslav B. Martynov, Alexey B. Sulimov, Fedor V. Grigoriev, and Vladimir B. Sulimov, "Surface Generalized Born Method: A Simple, Fast, and Precise Implicit Solvent Model beyond the Coulomb Approximation", *J. Phys. Chem. A - VOLUME 108, NUMBER 43, OCTOBER 28, 2004*
11. Avijit Ghosh, Chaya Sendrovic Rapp, and Richard A. Friesner, "Generalized Born Model Based on a Surface Integral Formulation", *J. Phys. Chem. B* 1998, 102, 10983-10990
12. Жабин С.Н., Сулимов В.Б. "Программа построения доступной растворителю поверхности для произвольных органических молекул и интерактивный просмотр положений лигандов в активных центрах белков", Сборник материалов XIII российского национального конгресса «Человек и лекарство», 3-5 апреля 2006, стр.15.
13. Сулимов В.Б., Жабин С. Н. Программа для ЭВМ TAGSS, Свидетельство о регистрации Федеральной службы по интеллектуальной собственности, патентам и товарным знакам № 2006613753 от 27 октября 2006 г

И.М. КУРЧАТОВ, Н.И. ЛАГУНЦОВ, В.Н. ТРОНИН

*Московский инженерно-физический институт (государственный университет),
ОАО "Аквасервис", Москва, Каширское шоссе, 31, aquaserv@mail.ru*

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА «ГАЗОВОГО ДИОДА» В АСИММЕТРИЧНЫХ НАНОПОРИСТЫХ МЕМБРАНАХ

Рассмотрен эффект «газового диода» в нанопористых мембранах с градиентом пористости. Построена модель двухслойной анизотропной мембраны и описано течение газа в такой мембране. Определены условия возникновения эффекта односторонней проводимости.

Асимметричные нанопористые мембраны могут обладать интересным свойством – иметь различную проницаемость в зависимости от направления перепада давления, т.е. являться «газовым диодом». К таким мембранам относятся композиционные и асимметричные мембраны, в которых размер пор меняется от слоя к слою скачком или непрерывно. Последний, так называемый селективный слой – непористый или нанопористый, с размером пор от десятых долей до единиц нанометров. Вблизи селективного слоя имеется нанопористый слой, размеры пор в котором составляют десятки нанометров.

В рамках существующих моделей газопроницаемости пористых и градиентно-пористых сред объяснить эффект «газового диода» невозможно. Этот эффект очевидно связан с тем, что в нанопористых слоях реализуется свободно-молекулярное течение газа, когда соударения молекул газа происходят в основном со стенками, а не друг с другом. Поэтому для мо-