

Конкурс ФПМУ 2014. Аннотационный отчёт.

Автор отчета: Смирнов Григорий Сергеевич

Данная работа посвящена исследованию свойств газовых гидратов. Газовые гидраты – это кристаллические соединения молекул воды и газа, напоминающие внешним видом лёд. Молекулы-гости, например, метан, аргон, углекислый газ, заключены внутри полостей, образованных молекулами воды. Стабилизация водных клатратных каркасов, термодинамически менее стабильных, чем лёд или жидкая вода при тех же условиях, обеспечивается за счёт ван-дер-ваальсовых взаимодействий гость–хозяин. Газовые гидраты широко распространены в природе и активно изучаются во всем мире. В частности, они рассматриваются как источник энергии будущего, могут применяться для транспортировки газа, а также образовываться в газопроводах, что приводит к их блокировке.

При давлениях $\sim 0.5-0.7$ ГПа в 2011 группа российских и польских ученых обнаружила формирование новой газогидратной структуры C_0 . Ее формирование позднее было подтверждено американскими учеными в работе, однако предложенные расшифровки были другими (структура типа α -кварца либо sT'). В наших работах предложенные экспериментаторами структуры исследованы методами молекулярной динамики. Показано, что структура типа α -кварца не может существовать из-за слишком маленького расстояния между молекулами воды при данных параметрах решетки. В то же время структуры C_0 и sT' остаются стабильными в ходе молекулярно-динамических расчетов и имеют близкие энергетические характеристики. Также было опровергнуто предположение, что молекулы воды находятся в каналах структуры C_0 , что приводило к дробному числу молекул водорода в элементарной ячейке.

Было проведено исследование процессов диффузии молекул водорода в структурах C_0 и sT' в диапазоне температур 140-260 К. Показано, что на наносекундных временах диффузия молекул водорода в гидратах имеет

анизотропный и аномальный характер. Методом молекулярной динамики анализировались средние квадраты смещений молекул-гостей в C_0 и sT' структурах водородных газовых гидратов. На временах до 10 нс они нелинейно зависят времени, реализуется режим субдиффузии. Данный эффект вызван в первую очередь геометрией системы, решетка молекул воды создает высокие энергетические барьеры, таким образом модель случайных блужданий становится неприменимой. Изменение температуры от 140 до 260К приводит к незначительному ускорению диффузии из-за увеличения вероятности прыжков молекул водорода между соседними каналами или клетками.

Анализ усредненных по времени траекторий и параметров эксцесса показывает, что количество таких событий по сравнению с общим числом молекул водорода невелико. Из полученных данных также можно сделать о характерных временах преодоления потенциальных барьеров. В структуре C_0 прыжки молекул между соседними каналами начинают давать вклад уже на 1 наносекунде, в то время для sT' число перескоков между клетками пренебрежимо мало вплоть до 10 нс.

Публикации 2014-2015 в рецензируемых научных журналах:

1. Г. С. Смирнов, В. В. Стегайлов. Аномальная диффузия молекул-гостей в водородных газовых гидратах. Теплофизика высоких температур, 2015, том 53, № 6, с. 872-880
2. V.V. Stegailov, N.D. Orekhov, G.S. Smirnov, HPC Hardware Efficiency for Quantum and Classical Molecular Dynamics // V. Malyskin (Ed.): PaCT 2015, LNCS 9251, pp. 469-473, 2015.
3. Г. С. Смирнов, В. В. Стегайлов. Молекулярно-динамические модели газовых гидратов и описание фазовых диаграмм. Вести газовой науки, №4(24), 2015 (в печати)

Выступления на конференциях ноябрь 2014-ноябрь 2015:

- 1) 57 научная конференция МФТИ, Москва, 24-29 ноября 2014 года. Смирнов Г.С., Стегайлов В.В. «Атомистическое моделирование гидратов водорода при высоких давлениях»
- 2) XIXth Research Workshop "Nucleation Theory and Applications", Dubna, Russia, April 11-18, 2015. G.S. Smirnov, V.V. Stegailov. "Gas Diffusion in Hydrogen Hydrates"
- 3) The International Supercomputing Conference (ISC), Frankfurt, Germany, July 12-16, 2015. V. Stegailov, N. Orekhov, G. Smirnov. "Coupling Efficiency of Models, Algorithms & Hardware: Atomistic Simulation Perspective"

- 4) International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond, Moscow, Russia, September 6-10. Smirnov G.S., Stegailov V.V. Application of atomistic simulation for modeling of gas hydrates
- 5) 13th International Conference on Parallel Computing Technologies August 31 - September 4, 2015, Petrozavodsk, Russia. V.V. Stegailov, N.D. Orekhov, G.S. Smirnov. "HPC Hardware Efficiency for Quantum and Classical Molecular Dynamics"
- 6) Международная конференция "Суперкомпьютерные дни в России" (Russian Supercomputing Days), 28 - 29 сентября 2015, г. Москва. Г.С. Смирнов, В.В. Стегайлов. "Как быстрее всего решать задачи квантового и классического атомистического моделирования, используя современное суперкомпьютерное программное и аппаратное обеспечение?"