

Рис. 1.

Лабораторная астрофизика.

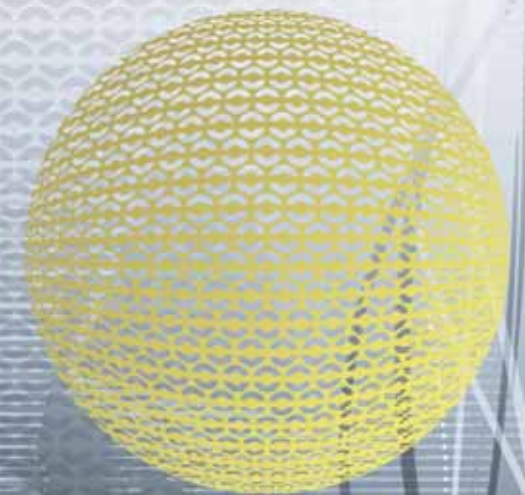
- 1 – Расширяющийся газовый пузырь от двойной звездной системы HH111 (фотография получена на Космическом телескопе имени Хаббла, Бо Рейпурт, NASA).
- 2 – Радиальная проволочная сборка на установке OEDIPE (Грама, Франция).
- 3 – Эксперимент на электрофизической установке OEDIPE (физическое моделирование «плазменного джета» из двойной системы звезд с помощью сжатия проволочной сборки).
- 4 – Трехмерный расчет MARPLE (распределение плотности плазмы в «джете»)

Работа поддержана Отделением математических наук РАН (проект 3 ОМН), Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 09 01 12109 офи_м, 09 02 01532 а, 10 02 00063 а, 10 02 00449 а), а также исследовательским центром г. Грама (Франция) при активном участии его сотрудников из группы экспериментального комплекса SPHINX. Расчеты выполнены на компьютерах СКИФ МГУ и МВС 100К МСЦ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Frontiers in High Energy Density Physics* / Ed. by D. Henderson – Washington, National Research Council, Nat. Acad. Press, 2003.
2. *Четверушкин Б.Н., Гасилов В.А., Грабовский Е.В.* Суперкомпьютеры и исследования сильноточных импульсных электрических разрядов // Суперкомпьютерные технологии в науке, образовании и промышленности / Под ред. акад. В.А. Садовниченко, акад. Г.И. Савина, чл.-корр. РАН Вл.В. Воеводина. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2009.
3. *Gasilov V., Dyachenko S., Olkhovskaya O., Boldarev A., Kartasheva E., Boldyrev S.* Object-Oriented Programming and Parallel Computing in Radiative Magnetohydrodynamics Simulations // IOS Press: *Advances in Parallel Computing*. 2008. Vol. 15.

Исследование фазового поведения мультиблок-сополимеров



24 Исследование фазового поведения мультиблок-сополимеров

В данной работе исследовано фазовое поведение расплавов регулярных и случайных мультиблок-сополимеров. Построение фазовой диаграммы таких систем является важной задачей, так как полимерные системы имеют множество технологических приложений. С помощью моделирования впервые показано, что расплавы случайных сополимеров могут формировать микроструктуры с дальним порядком.

АВТОРЫ:

А.А. Гаврилов – студент, физический факультет МГУ;
e-mail: gavrilov@polly.phys.msu.ru

А.В. Чертович – научный сотрудник, физический факультет МГУ;
e-mail: chertov@polly.phys.msu.ru

П.Г. Халатур – профессор, ИНЭОС РАН, Университет г. Ульм, Германия;
e-mail: khalatur@polly.phys.msu.ru

Введение

Связанность мономерных звеньев в макромолекулы вносит существенный вклад в термодинамические свойства полимерных систем. Из-за пониженной энтропии гомополимеры А и В сегрегируют при гораздо меньших энергиях отталкивания, чем низкомолекулярные вещества. Термодинамическое поведение раствора или расплава АВ-сополимера гораздо богаче из-за возможности формирования микроструктур различной морфологии. Блок-сополимеры привлекают все возрастающий интерес из-за их способности к самоорганизации в нано- и микродомены с симметричной структурой и хорошими механическими свойствами. Область технологических приложений блок-сополимеров необычайно широка, она охватывает маски для нанолитографии, образцы для контролируемого упорядочения наночастиц и создания сред с нанопорами, создание функциональных покрытий, протон-проводящие материалы, средства хранения данных с высокой плотностью записи информации и многие другие области [1].

В литературе можно найти систематические исследования только для диблок- и частично для триблок-сополимеров и их смесей [2], где блоки длиной 10–100 единиц формируют структуры размером 20–200 нм. Хотя переход от диблок-сополимеров к мультиблок-сополимерам, которые состоят из большого количества А и В блоков, кажется естественным способом уменьшения характерных размеров упорядочения при сохранении механических свойств, литературные данные по упорядочению мультиблок-сополимеров имеют довольно фрагментарный характер. Значительная часть работ исследует регулярные мультиблок-сополимеры, которые могут формировать структуры с высокой периодичностью. В области исследования случайных сополимеров ситуация имеет совсем другой характер. За последние два десятилетия было опубликовано множество теоретических работ, однако полученные в них результаты не получили подтверждения, как экспериментального, так и посредством компьютерного моделирования. В отсутствие лабораторных экспериментов компьютерное моделирование является мощным инструментом для проверки теоретических предсказаний и исследования поведения систем, выходящих за рамки применимости существующих теорий.

Исследуемые системы и методы

В качестве исследуемой системы нами был выбран расплав (растворитель отсутствует) двухкомпонентных АВ-сополимеров состава 50/50 с различными молекулярно-массовыми и блочно-массовыми распределениями. В качестве первой

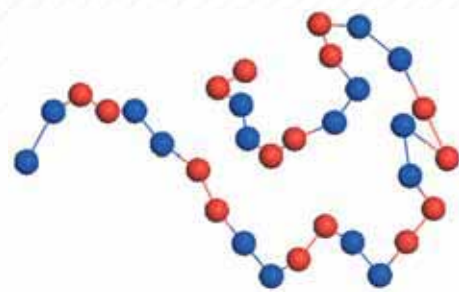


Рис. 1.
Вид полимерной цепи в системе reg-2

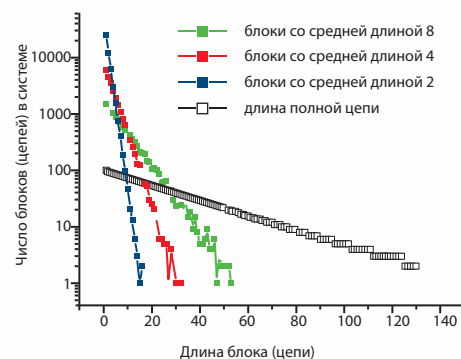


Рис. 2.
Молекулярно-массовые и блочно-массовые распределения для систем ran-2, ran-4 и ran-8

группы систем мы взяли расплав регулярных мультимод-сополимеров с одинаковой длиной цепи — 32, но разными длинами чередующихся блоков — 2, 4 и 8 (т.е., например, сополимеры с длиной блока 4 состояли из строго чередующихся блоков 2A-2B-2A-2B-..., см. рис.1). Будем называть эти системы reg-2, reg-4 и reg-8 соответственно. Вторая группа систем состояла из расплавов случайных мультимод-сополимеров со средней длиной цепи 32 и средними длинами блоков 2, 4 и 8 (см. рис.2). Будем называть эти системы ran-2, ran-4 и ran-8 соответственно. Такие системы соответствуют результату проведения неконтролируемой реакции (например, поликонденсации) в гомогенном расплаве мономеров типа А и В.

Для моделирования полимерных расплавов, обладающих огромной вязкостью и, как следствие, большим временем прихода к термодинамическому равновесию в системе, не подходят обычные методы моделирования (такие, как молекулярная динамика) из-за малости временных интервалов, которые можно в них исследовать за приемлемое время моделирования. Поэтому для моделирования таких систем используются так называемые coarse grained («огрубленные») методы, в которых каждой частице в моделируемой системе соответствует некоторый набор молекул (например, несколько мономерных звеньев) в реальной. В нашей работе мы использовали метод DPD (dissipative particle dynamics — диссипативная динамика частиц) [3], в котором для расчета сил взаимодействия между частицами используются специальные усредненные «мягкие» потенциалы, которые позволяют существенно увеличить шаг интегрирования уравнений Ньютона, что позволяет добиться увеличения общего времени наблюдения системы.

Для каждой из исследуемых систем строилась фазовая диаграмм, то есть поведение системы при различных параметрах отталкивания между А и В звенья-

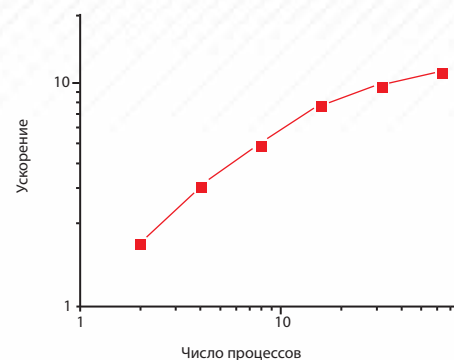


Рис. 3.
Исследование эффективности распараллеливания метода DPD на кластере «Ломоносов»

большого числа процессоров неэффективно. Результаты исследования эффективности распараллеливания на кластере «Ломоносов» представлены на рис. 3.

Полученные результаты

Каждая из вышеперечисленных систем, состоящая из 100 тысяч частиц, моделировалась на 24 ядрах кластера «Чебышев». На расчет одной системы (примерно 6 млн шагов) требовалась неделя счета. Некоторые полученные результаты изображены на рис. 4 и 5. Нам удалось показать, что расплавы случайных сополимеров могут формировать упорядоченные структуры. Кроме того, при больших средних длинах блока образуются структуры неламелярного типа (если точнее, то образуется структура типа «двойной алмаз»), что для линейных цепочек состава 50/50 ранее никогда не наблюдалось.

Выводы

Развитие параллельных суперкомпьютерных технологий позволяет эффективно моделировать сложные системы, исследование которых другими методами требует больших трудозатрат. Использование параллельных программ и мощных кластеров ускоряет счет в десятки раз, что позволяет получать большое количество интересных научных результатов в приемлемые сроки. Вариант использования параллельных программ в моделировании был проде-

ми. Характеристикой отталкивания является параметр Флори—Хаггинса χ .

В ходе работы программного кода, исполняемого на многих процессорах одновременно, моделируемая система разбивается на группы атомов, взаимодействия и движения каждой из которых рассчитываются отдельным ядром (domain decomposition). Для корректного интегрирования уравнений движения при таком способе распараллеливания необходим интенсивный обмен данными между процессорами. Дополнительные сложности вносит связанность частиц в цепи, поэтому использование очень

монстрирован нами на примере исследования фазового поведения мультиблок-сополимеров. Еще 3–4 года назад решать подобные задачи в России было невозможно, с вводом в эксплуатацию новых кластеров, таких, как «Чебышев» и «Ломоносов», данные задачи можно решить за 2–3 месяца (при использовании достаточного количества процессорных ядер).

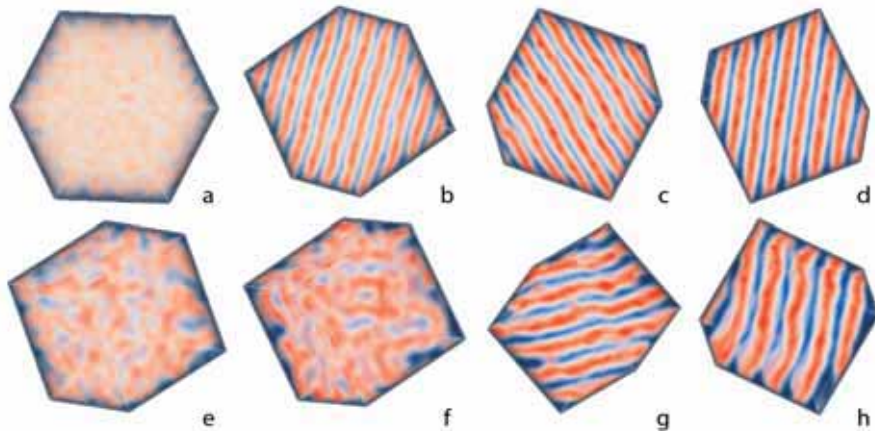


Рис. 4.
Скриншоты полученных систем: а) – reg-4 @ $\chi = 3.1$, б) – reg-4 @ $\chi = 9.2$, в) – reg-4 @ $\chi = 15.3$, д) – reg-4 @ $\chi = 42.8$, е) – ran-4 @ $\chi = 3.1$, ф) – ran-4 @ $\chi = 9.2$, г) – ran-4 @ $\chi = 15.3$, х) – ran-4 @ $\chi = 42.8$

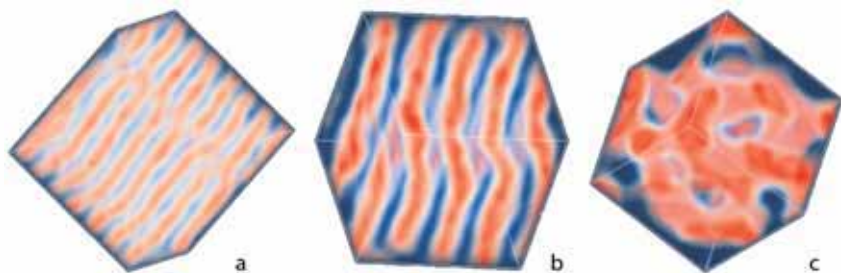


Рис. 5.
Скриншоты систем при одинаковом $\chi = 30.6$: а) – ran-2, б) – ran-4, в) – ran-8

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kim H.-C., Park S.-M., Hinsberg W.D. // Chem Rev. 110 (2010). 146.
2. Abetz V., Simon P.F.W. // Adv. Polym. Sci. 189 (2005). 125.
3. Groot R.D., Warren P. B. // J. Chem. Phys. 107 (1997). 11.

Использование суперкомпьютерных технологий в задачах прочности. Пакет Fidesys

