

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
НАНОКЛАСТЕРОВ МЕТОДОМ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Учебно-методическое пособие

Составители:
Е.В. Богатилов,
Л.А. Битюцкая,
А.Н. Шебанов

Издательско-полиграфический центр
Воронежского государственного университета
2013

Утверждено научно-методическим советом физического факультета 5 июля 2013 г., протокол № 7

Рецензент д-р физ.-мат. наук, проф. кафедры физики твердого тела и наноструктур ВГУ Ю.А. Юраков

Учебно-методическое пособие подготовлено на кафедре физики полупроводников и микроэлектроники Воронежского государственного университета.

Рекомендуется для выполнения лабораторных работ по курсу «Моделирование приборов нанoeлектроники в специализированных пакетах» и для самостоятельной работы студентов 1-го курса дневного отделения магистратуры физического факультета ВГУ, обучающихся по программе высшего профессионального образования.

Для направления 210100 – Электроника и нанoeлектроника

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	4
2. Классификация наноразмерных частиц	5
2.1. Типы кластерных структур	5
2.2. Разновидности кластеров	7
3. Метод молекулярной динамики	10
3.1. Численная аппроксимация уравнений движения	10
3.2. Потенциал межчастичного взаимодействия	10
3.2.1. Классический потенциал взаимодействия	12
3.2.2. Квантовомеханический потенциал взаимодействия	16
3.3. Краевые условия	18
3.4. Метод молекулярной динамики микроканонического и канонического ансамблей	20
3.5. Измерение макроскопических величин и свойства переноса	21
4. Программный пакет HyperChem 6.0	24
5. Практические задания	31
Приложение 1. Структура Snapshot-файлов	33
Приложение 2. Структура HIN-файлов	37
Литература	40

1. Введение

Развитие нанотехнологий предъявляет новые требования к методам компьютерного эксперимента. Главный объект нанотехнологий, являющийся основным «строительным материалом» и определяющий уникальные свойства нанотехнологических изделий, - это наноразмерные частицы, или кластеры. Кластер – это система связанных атомов и молекул. Его свойства качественно отличны как от свойств атомов, составляющих кластер, так и от свойств макроскопического вещества. В настоящее время актуальными являются задачи получения устойчивых наночастиц и исследования их физических свойств. Как правило, задача устойчивости наноразмерных частиц не поддается аналитическому решению. Изучение свойств наночастиц также представляет собой достаточно трудную экспериментальную задачу. Поэтому стадиям производства и экспериментального исследования наночастиц, как правило, предшествует компьютерное моделирование. Компьютерный эксперимент позволяет решить вопрос о возможности существования тех или иных наночастиц, оптимизировать условия их получения, предсказать свойства.

К числу наиболее эффективных методов компьютерного эксперимента относится метод молекулярной динамики (МД), который моделирует движение атомов и молекул, составляющих рассматриваемую систему. МД позволяет изучать структурные переходы, термодинамические параметры, свойства переноса, а также электронные состояния в сложных системах. Возрастающая вычислительная мощность компьютеров постоянно расширяет спектр возможных приложений метода МД. В настоящее время успешно моделируется поведение достаточно сложных систем, содержащих десятки тысяч атомов.

Современные достижения в области молекулярного моделирования реализованы в ряде программных пакетов, таких как Chemistry Office, Gromacs, HyperChem.

2. Классификация наноразмерных частиц

При делении массивного тела на все более мелкие части, его свойства постепенно изменяются, в результате чего образуется новая фаза вещества, отличная от твердых тел, жидкостей и газов и называемая микрокластером (от англ. cluster – гроздь, группа, скопление). Микрокластеры представляют собой мельчайшие агрегаты, включающие от двух до нескольких сотен и более атомов.

Понятие «кластер» было введено в науку только в 60-х годах XX века. Это обусловлено тем, что вплоть до 50-х годов из-за микроскопических размеров и высокой реакционной способности кластеры не удавалось синтезировать в лабораторных условиях. Интенсивное и систематическое изучение кластеров связано с получением кластерных пучков (во второй половине 50-х годов) и последующим развитием этой техники. В настоящее время физика кластеров является новым быстро развивающимся научным направлением.

2.1. Типы кластерных структур

В простейшем случае кластер удобно описывать моделями, в которых атомы заменены шарами. Возможны две основные структуры кластеров – с плотной и мягкой упаковкой. В первом случае расстояние между ближайшими соседями строго фиксировано. Существуют две основные плотные упаковки: кубическая гранецентрированная и гексагональная.

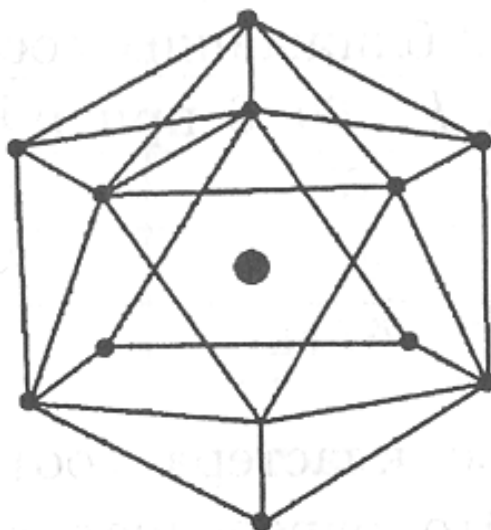


Рис.1. Кластер-икосаэдр [1].

В плотной упаковке каждый атом имеет 12 ближайших соседей. Мягкой называют такую упаковку, в которой расстояния между ближайшими соседями находятся в некотором интервале. Важнейшей структурой, имеющей мягкую упаковку, является структура икосаэдра. На рис.1 приведена структура простейшего 13-атомного кластера, в котором все атомы, кроме одного, расположены в вершинах икосаэдра. При построении более сложных кластеров-икосаэдров можно пользоваться следующими правилами. Кластер, содержащий 55 атомов, содержит в качестве ядра 13-атомный икосаэдр. К каждой из вершин ядра и к каждому центру 30-ти ребер добавляется по одному атому. Следующий кластер серии содержит 147 атомов и включает в качестве ядра 55-атомный кластер. К ядру добавляются: 12 атомов к вершинам икосаэдра, 20 атомов в центры каждой из 20 граней, 60 атомов по два атома вдоль каждого из 30 ребер.

При моделировании систем, в которых атомы или молекулы связаны Ван-дер-Ваальсовым взаимодействием, появление перечисленных типов структур является наиболее вероятным.

2.2. Разновидности кластеров

Кластеры из атомов инертных газов. Представляют собой простейший и наиболее изученный тип кластеров. На рис.2. изображен кластер из атомов аргона, содержащий 16 атомов. Атомы инертных газов с полностью заполненными электронными оболочками слабо взаимодействуют друг с другом посредством Ван-дер-Ваальсовых сил.

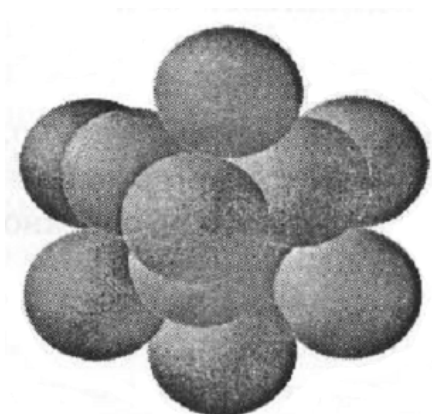


Рис.2. Кластер аргона [1].

При описании таких кластеров с достаточно хорошей точностью применима модель твердых шаров. В настоящее время удается создавать кластеры из атомов инертных газов, содержащие от нескольких единиц до десятков тысяч атомов. Кластеры из атомов инертных газов представляют собой уникальный объект для изучения атом-атомных взаимодействий, различных типов возбуждений в таких кластерах, электрон-атомного взаимодействия и т.д. К числу важных технических применений кластеров из атомов инертных газов относятся: выравнивание поверхностей, в частности создание идеально ровных поверхностей зеркал; очистка поверхностей – поверхностные примеси удаляются при ее бомбардировке кластерными ионами; поверхностная имплантация и многие другие.

Металлические кластеры. Содержат от нескольких единиц до нескольких десятков тысяч атомов. В металлических кластерах из нескольких атомов может реализоваться как ковалентный, так и металлический тип связи. Металлические кластеры - важный пример конечной Ферми-системы и по своим свойствам во многом аналогичны атомным ядрам. Металлические кластеры используют в технике в качестве катализаторов благодаря их высокой реакционной способности. С металлическими кластерами, имплантированными в матрицу, связывают будущий прогресс в нанотехнологии.

Ионные кластеры. Структура ионных кластеров близка к структуре объемного кристалла, представляя собой пример нанокристаллов. Ионные нанокристаллы могут найти применение при создании молекулярных фотодетекторов, в различных разделах микроэлектроники и электрооптики.

Фуллерены. Это природная форма углерода, существующая наряду с графитом и алмазом. Фуллерены представляют собой полые внутри кластеры, замкнутая поверхность которых образована правильными многогранниками из атомов углерода. Особое место среди фуллеренов занимает кластер из 60 атомов углерода – C_{60} , который напоминает футбольный мяч (рис.3). Его поверхность образована из пяти- и шестиугольников. Широкое изучение фуллеренов началось после 1990 года, когда был открыт метод получения фуллеренов в макроскопических количествах из графита в электродуговом разряде.

Фуллерены имеют широкую область применения, которая включает: создание новых типов смазок и антифрикционных покрытий, новые типы топлива, алмазоподобных соединений сверхвысокой твердости. С фуллеренами связаны надежды на создание новых классов сверхпроводников, новых классов соединений для фармакологии,

медицины. За открытие фуллеренов в 1996 г. Р.Керлу, Р.Смолли и Г.Крото была присуждена Нобелевская премия.

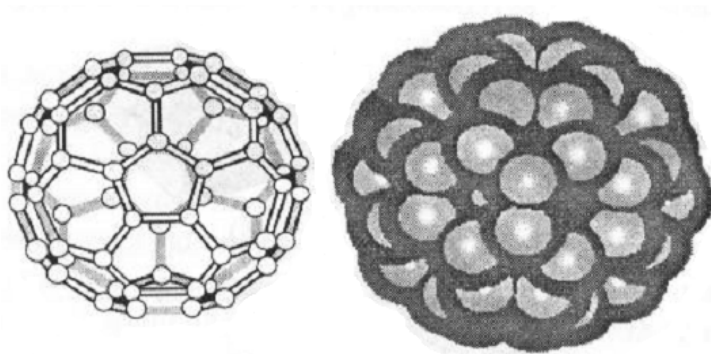


Рис.3. Фуллерен [1].

Фрактальные кластеры. Фрактальным называется объект с разреженной структурой – рис.4. При наблюдении таких объектов с возрастающим увеличением можно видеть, что они проявляют повторяющуюся на разных уровнях картину. Фрактальной структурой обладают: сажа, коллоиды, а также имеющие широкую область применения аэрозоли и аэрогели.

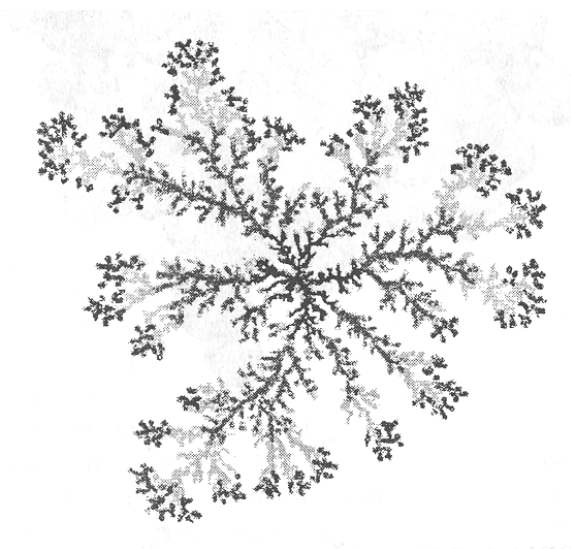


Рис.4. Фрактальный кластер [1].

Молекулярные кластеры. К сложным молекулярным кластерам можно отнести, например, биологические макромолекулы.

3. Метод молекулярной динамики

Метод МД рассчитывает в фазовом пространстве траектории совокупности молекул, каждая из которых подчиняется классическим законам движения. Обычно в методе МД используют уравнения Ньютона:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \mathbf{a}_i = \frac{1}{m_i} \mathbf{F}_i,\end{aligned}\tag{1}$$

где \mathbf{r}_i – координаты i -ой частицы, \mathbf{v}_i – скорость, m_i – масса, \mathbf{a}_i – ускорение, \mathbf{F}_i – сила, действующая на частицу i со стороны всех остальных частиц.

Силы, действующие в системе, определяют через потенциальную энергию взаимодействия частиц V :

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}_i}.\tag{2}$$

Для расчета траектории молекул необходимо:

- 1) Выбрать численную схему аппроксимации уравнений движения;
- 2) Задать потенциал межчастичного взаимодействия;
- 3) Задать граничные и начальные условия.

3.1. Численная аппроксимация уравнений движения

Для численного решения уравнений движения (1) производные заменяют конечными разностями. Обычно для этого используют численные схемы, основанные на разложении координат и скоростей в ряд Тейлора по временному шагу Δt . Пусть $\mathbf{r}_i^{(n)} = \mathbf{r}_i(n\Delta t)$, $\mathbf{v}_i^{(n)} = \mathbf{v}_i(n\Delta t)$ – значения координаты и скорости на n -ом временном шаге, тогда ряды Тейлора примут вид:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^{(n+1)} &= \mathbf{v}_i^{(n)} + \mathbf{a}_i^{(n)} \Delta t + O[(\Delta t)^2], \\ \mathbf{r}_i^{(n+1)} &= \mathbf{r}_i^{(n)} + \mathbf{v}_i^{(n)} \Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i^{(n)} \cdot (\Delta t)^2 + O[(\Delta t)^3].\end{aligned}\tag{3}$$

Сохранение членов, содержащих первую степень Δt , приводит к методу Эйлера:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^{(n+1)} &= \mathbf{v}_i^{(n)} + \mathbf{a}_i^{(n)} \Delta t, \\ \mathbf{r}_i^{(n+1)} &= \mathbf{r}_i^{(n)} + \mathbf{v}_i^{(n)} \Delta t.\end{aligned}\tag{4}$$

Точность метода Эйлера невысока. Его локальная погрешность (погрешность на шаге), имеет величину $O[(\Delta t)^2]$, однако накопление погрешности от шага к шагу приводит к глобальной погрешности порядка $O(\Delta t)$. Одной из причин является асимметричность метода: продвигая решение на один временной шаг Δt , он использует значение скорости только из начальной точки интервала. Этот недостаток преодолевается в методе полушага (в англоязычной литературе – leap-frog method), который принимает, что средняя скорость на отрезке равна значению скорости в середине отрезка:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}_i^{(n+1/2)} &= \mathbf{v}_i^{(n-1/2)} + \mathbf{a}_i^{(n)} \Delta t, \\ \mathbf{r}_i^{(n+1)} &= \mathbf{r}_i^{(n)} + \mathbf{v}_i^{(n+1/2)} \Delta t.\end{aligned}\tag{5}$$

Этот метод не является «самостартующим», его необходимо дополнить условием:

$$\mathbf{v}_i^{(1/2)} = \mathbf{v}_i^{(0)} + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i^{(0)} \Delta t.\tag{6}$$

Другая широко используемая численная схема - это скоростной алгоритм Верлета (Verlet algorithm):

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_i^{(n+1)} &= \mathbf{r}_i^{(n)} + \mathbf{v}_i^{(n)} \Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}_i^{(n)} \cdot (\Delta t)^2, \\ \mathbf{v}_i^{(n+1)} &= \mathbf{v}_i^{(n)} + \frac{1}{2} (\mathbf{a}_i^{(n+1)} + \mathbf{a}_i^{(n)}) \Delta t.\end{aligned}\tag{7}$$

Схема (7) является самостартующей и имеет третий порядок глобальной погрешности по координате и второй по скорости.

3.2. Потенциал межчастичного взаимодействия

Правильный выбор потенциала взаимодействия является важнейшим условием адекватного моделирования свойств изучаемой системы. Возможны два базовых подхода к описанию молекулярно-динамической модели физической системы: классический и квантовомеханический. Классический подход рассматривает атомы как материальные точки, обладающие массой и зарядом, при этом не учитывается сложная структура атомов. Взаимодействие между атомами и молекулами описывается формулами, имеющими эмпирический характер и содержащими ряд подгоночных параметров. Этот подход позволяет определять устойчивые конфигурации моделируемой системы, изучать кинетику протекания фазовых переходов. Квантовомеханический подход учитывает электронную подсистему атомов и позволяет рассчитывать энергетические уровни моделируемой системы, конфигурацию электронных орбиталей, спектры поглощения и т.д.

3.2.1. Классический потенциал взаимодействия

В общем случае классический потенциал взаимодействия включает компоненты, отвечающие за межмолекулярное и за внутримолекулярное взаимодействия. В свою очередь, они могут быть двухчастичными (т.е. зависящими от положения двух атомов) и многочастичными (зависящими от положения трех и более атомов).

Межмолекулярное, или ван-дер-ваальсово, взаимодействие проявляется на расстояниях, исключающих возможность перекрывания электронных орбиталей. Слабые силы притяжения Ван-дер-Ваальса действуют в веществах, находящихся в газообразном или жидком состояниях, а также между молекулами в молекулярных кристаллах. Притяжение Ван-дер-Ваальса имеет электрическую природу и является результатом действия трех эффектов – ориентационного, индукционного и дисперсионного. Ориентационный эффект возникает в полярных веществах и обусловлен диполь-дипольным взаимодействием. Индукционный эффект связан с поляризацией молекул неполярного вещества диполями окружающей среды. Наиболее универсальным является дисперсионный эффект, имеющий квантово-механическую природу и обусловленный синхронизацией движения мгновенных диполей взаимодействующих частиц. Вследствие несовпадения центров тяжести зарядов электронного облака и атомного ядра в некоторый момент времени, атом представляет собой мгновенный диполь. Влияние диполей на ориентацию подобных мгновенных диполей, возникающих в ближайших молекулах, приводит к их синхронизации. В результате соседние частицы начинают испытывать взаимное притяжение.

Простейшим двухчастичным потенциалом, хорошо описывающим взаимодействие Ван-дер-Ваальса, является потенциал Леннарда-Джонса (рис.5):

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (8)$$

где ε – энергетическая константа, определяющая глубину потенциальной ямы; σ – масштабная константа ($\phi(\sigma) = 0$); r – межмолекулярное расстояние. На практике, для ускорения вычислений потенциал Леннарда-Джонса обнуляют на расстоянии от 2.5σ до 5.5σ .

Модельными веществами, свойства которых хорошо описываются простейшим потенциалом (8), являются инертные газы. В таблице 1 приведены константы σ и ε для инертных газов.

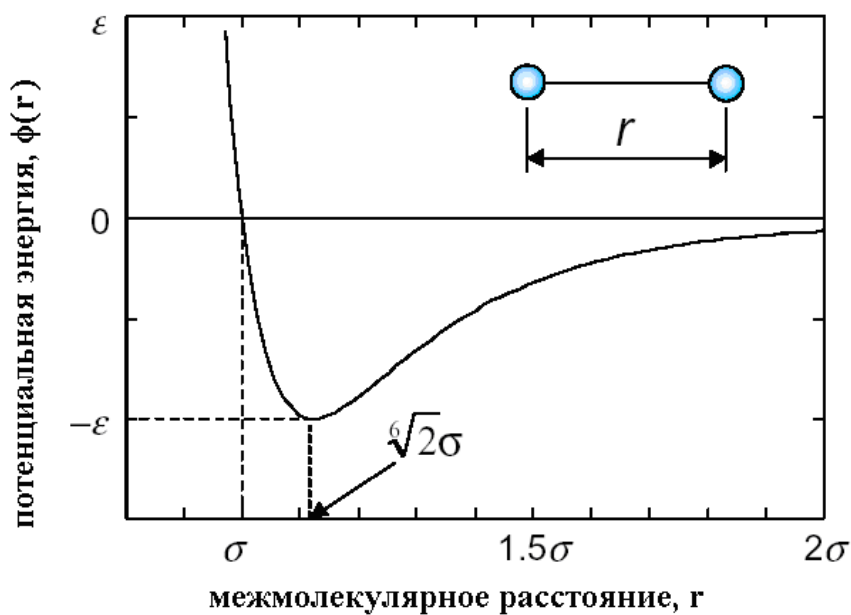


Рис.5.Потенциал Леннарда-Джонса [2].

Таблица 1. Константы потенциала ЛД для инертных газов

	$\sigma, \text{Å}$	$\varepsilon/k_B,$ К
Ne	2.74	36.2
Ar	3.40	121
Kr	3.65	163
Xe	3.98	232

Для сложных молекулярных систем, таких как органические и биологические молекулы, необходимо учитывать наличие

внутримолекулярных связей. В простейшем случае потенциал, обусловленный наличием связей, имеет вид:

$$\begin{aligned} \phi = & \frac{1}{2} \sum_{\text{по связям}} k_{ij}^r (r_{ij} - r_{eq})^2 + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\text{по углам} \\ \text{изгиба}}} k_{ijk}^{\theta} (\theta_{ijk} - \theta_{eq})^2 + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\text{по углам} \\ \text{закручивания}}} k_{ijkl}^{\varphi, m} (1 + \cos(m\varphi_{ijkl} - \gamma_m)) \end{aligned} \quad (9)$$

где первое слагаемое моделирует потенциал растяжения-сжатия на основе закона Гука. Второе и третье слагаемое моделируют вклад, который вносит отклонение углов между связями (а также между плоскостями, в которых лежат связи) от своих равновесных значений. На рис.6 поясняются величины, входящие в выражение (9).

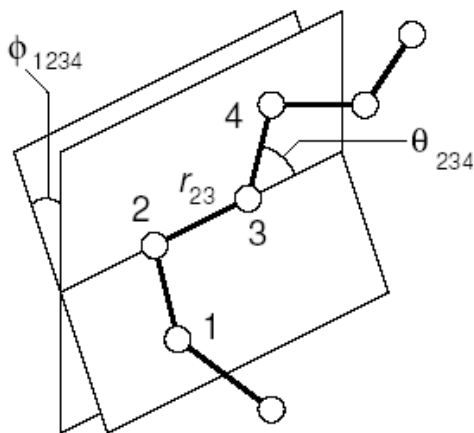


Рис.6. Геометрия простой цепочечной молекулы [3].

Полный потенциал взаимодействия для сложных систем включает также электростатическое взаимодействие в виде кулоновского потенциала

$$\phi(R_{ij}) = \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon R_{ij}}, \quad (10)$$

а также взаимодействие Ван-дер-Ваальса, например, в форме потенциала Леннарда-Джонса. Эти взаимодействия рассчитывают только для атомов, принадлежащих различным молекулам, а также для атомов из одной молекулы, разделенных несколькими связями (обычно, не менее, чем тремя).

Использование потенциала (9) обычно необходимо и для относительно простых кристаллических систем, содержащих ковалентные связи (таких как кремний и германий). Потенциал (8) не способен адекватно моделировать кристаллы с ковалентными связями, и учет связей необходим для стабилизации кристаллической решетки.

3.2.1. Квантовомеханический потенциал взаимодействия

Квантовомеханический подход основывается на решении уравнения Шрёдингера:

$$H\Psi = E\Psi, \quad (11)$$

где H – гамильтониан моделируемой системы, E – полная энергия системы, Ψ – волновая функция системы. При компьютерном моделировании обычно используют приближение Борна-Оппенгеймера, согласно которому ядра считают неподвижными и учитывают только движение электронов. В рамках этого приближения можно записать уравнение Шрёдингера для электронов:

$$H_{elec} \Psi_{elec} = E_{elec} \Psi_{elec}, \quad (12)$$

причем в рамках одноэлектронного приближения гамильтониан H_{elec} может быть записан в виде суммы эффективных одноэлектронных гамильтонианов:

$$H_{elec} = \sum_i H_i^{eff}. \quad (13)$$

Таким образом, задача сводится к решению одноэлектронных уравнений Шрёдингера для волновой функции ψ , описывающей отдельный электрон:

$$H^{eff} \psi = \varepsilon \psi, \quad (14)$$

Это уравнение допускает множество решений ψ_i и ε_i , называемых молекулярными орбиталями и орбитальными энергиями, соответственно.

Для расчета молекулярных орбиталей можно использовать несколько подходов. Чаще всего используют метод, представляющий молекулярные орбитали в виде линейной комбинации атомных орбиталей (MO-LCAO), а также методы самосогласованного поля (методы Хартри-Фока).

В первом случае молекулярные орбитали представляют в виде

$$\psi_i = \sum_v C_{vi} \phi_v, \quad (15)$$

где ϕ_v - это атомные орбитали, явный вид которых зависит от сорта атомов и используемого приближения (многие методы учитывают только валентные электроны).

В методах самосогласованного поля гамильтониан в уравнении (14) заменяют оператором Фока F , который неявно зависит от решений ψ_i . Оператор F включает в себя оператор кинетической энергии электрона, а также потенциальную энергию взаимодействия электрона с неподвижным ядром и усредненным полем остальных электронов. Алгоритм методов Хартри-Фока состоит из следующих шагов:

- задается положение всех электронов, т.е. заполняются орбитали ψ_i ;
- рассчитывается усредненный потенциал взаимодействия с остальными электронами;
- решается уравнение (14) и определяются уточненные волновые функции электронов;

- процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность.

Полная потенциальная энергия в квантовомеханической модели состоит из суммы энергии электронов и энергии кулоновского взаимодействия ядер:

$$V(\mathbf{r}) = E_{elec}(\mathbf{r}) + V_{nn}(\mathbf{r}, \mathbf{r}). \quad (16)$$

Для вычисления траектории движения частиц методом МД можно сделать предположение, что масса атомов и/или молекул достаточно велика и позволяет использовать классическое приближение. Поэтому после вычисления потенциальной энергии по формуле (16), квантовомеханический подход полностью аналогичен классическому. Потенциальная энергия используется для вычисления сил, действующих на частицы, после чего решаются уравнения Ньютона.

3.3. Краевые условия

При МД моделировании число частиц обычно невелико и не превышает нескольких тысяч. Следствием этого является большая доля частиц, находящихся на границе. В случае, когда целью моделирования является изучение свойств макроскопической системы, необходимо использовать граничные условия, минимизирующие размерные эффекты. Наиболее распространенным приемом является применение периодических граничных условий (рис.6). В этом случае базовая ячейка окружается своими точными копиями. При этом используются следующие правила:

- когда частица покидает базовую ячейку, с противоположной стороны в ячейку влетает ее копия;

- при расчете потенциальной энергии учитывается взаимодействие частиц из базовой ячейки как с частицами внутри базовой ячейки, так и с частицами ячеек-копий;

- для систем, не содержащих дальнедействующих потенциалов (таких, как кулоновский), используется правило ближайшей частицы, в соответствии с которым радиус взаимодействия ограничивается половиной размера ячейки.

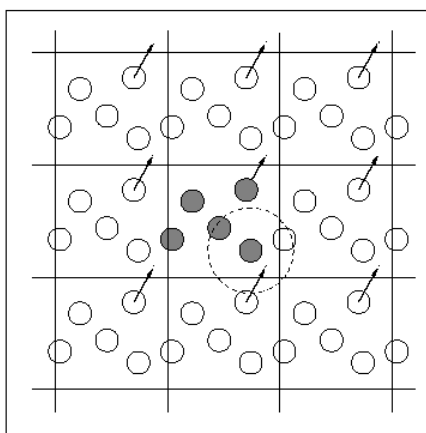


Рис.7. Периодические граничные условия [3].

В случае газовой фазы (потенциальная энергия много меньше кинетической) можно использовать зеркальные граничные условия, при которых частицы упруго отражаются от стенок.

Другой возможный тип граничных условий - это несколько слоев неподвижных молекул или слой пара.

Гораздо меньшее влияние на результаты моделирования оказывает выбор начальных условий, т.е. задание скоростей на первом шаге интегрирования. Почти независимо от их выбора, система с течением некоторого времени перейдет в свое равновесное состояние с больцмановским распределением скоростей, имеющим следующий вид:

$$dn = F(v)dv = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{mv^2}{2kT} \right) v^2 dv.$$

Распределение Максвелла-Больцмана достигает максимума при $v = \sqrt{2kT/m}$, таким образом, зная распределение молекул по скоростям, можно оценить, например, массу молекул или температуру.

Наиболее естественным выбором начальных скоростей является выбор нулевых начальных значений или случайных скоростей, распределенных по Больцману. Для обеспечения неподвижности базовой ячейки суммарный импульс частиц должен равняться нулю.

3.4. Метод молекулярной динамики микроканонического и канонического ансамблей

При интегрировании уравнений (1) полная энергия системы должна сохраняться. В результате, изменения кинетической энергии системы и потенциальной энергии должны компенсировать друг друга. При этом температура, определяемая кинетической энергией, не является постоянной величиной. В терминах статистической физики можно сказать, что МД моделирует микроканонический ансамбль: система движется в фазовом пространстве вдоль траектории с постоянной энергией. Энергия задается начальными условиями. Координаты атомов определяют вклад потенциальной энергии, скорости – кинетической. Поскольку трудно заранее выбрать начальные условия, соответствующие требуемой полной энергии, обычно используют процедуру перенормировки скоростей, которая производится до достижения требуемого состояния. Поскольку при изменении скоростей система переходит в неравновесное состояние, между перенормировками должно проходить время, достаточное для установления равновесия. Контроль за полной энергией позволяет проверить адекватность моделирования. Если энергия не сохраняется, значит, выбрана

недостаточно устойчивая численная схема или существенный вклад вносит отсечка потенциала. Некоторые флуктуации в полную энергию системы вносит использование периодических граничных условий, так как при выходе частицы из базовой ячейки, частица, которая входит в ячейку с противоположной стороны, попадает в новое окружение.

Во многих случаях требуется исследовать систему, в которой сохраняется не полная энергия, а температура. Этой модели соответствует канонический ансамбль, в котором моделируемая система помещается в термостат. Взаимодействие системы с тепловым резервуаром приносит флуктуации энергии, необходимые для достижения заданной температуры. В рамках молекулярной динамики взаимодействие с термостатом обеспечивается перенормировкой скоростей. В отличие от моделирования микроканонического ансамбля, при котором перенормировка производилась до момента достижения требуемого состояния, моделирование канонического ансамбля предполагает постоянную перенормировку скоростей на каждом шаге интегрирования. Для того, чтобы связать систему с термостатом, находящимся при температуре T_0 можно использовать следующий множитель нормировки:

$$\lambda = \left[1 + \frac{\Delta t}{\tau} \left(\frac{T_0}{T} - 1 \right) \right]^{1/2}, \quad (17)$$

где τ – время релаксации.

3.5. Измерение макроскопических величин и свойства переноса

Макросостояние системы характеризуют температурой T , давлением P и полной энергией E . Температура выражается через кинетическую энергию согласно теореме о равнораспределении.

$$T = \frac{1}{d N k_B} \left\langle \sum_{i=1}^N m_i v_i^2 \right\rangle, \quad (18)$$

где d – число степеней свободы (для моноатомных молекул в трехмерном пространстве $d = 3$), усреднение $\langle \dots \rangle$ производится по времени.

Для вычисления давления можно использовать теорему о вириале:

$$P = \frac{N}{V} k_B T + \frac{1}{V d} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle, \quad (19)$$

где \mathbf{F}_i – сила, действующая частицу i со стороны всех остальных частиц.

Полная энергия системы представляет собой сумму полной кинетической и потенциальной энергии:

$$E = \frac{d}{2} N k_B T + \left\langle \sum_i \sum_{j>i} \varphi(\mathbf{r}_{ij}) \right\rangle \quad (20)$$

Важной тепловой характеристикой, которую можно непосредственно оценить при МД-моделировании, является теплоемкость при постоянном объеме C_V . Из определения

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \quad (21)$$

следует, что теплоемкость можно определить путем вычисления энергии при близких значениях температуры. На практике удельную теплоемкость $c_V = C_V/N$ можно найти путем вычисления не полной, а потенциальной энергии. Согласно (20), теплоемкость складывается из температурной зависимости потенциальной энергии и температурной зависимости кинетической энергии, которая равна $(d/2)k_B$.

В качестве структурной характеристики используют парную корреляционную функцию $g(r)$. Если $n(r)$ – среднее число частиц, расположенных на расстояниях $r, \dots, r+\Delta r$ от данной частицы, то

$$g(r) = \frac{V}{N} \frac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r}. \quad (22).$$

Корреляционная функция позволяет идентифицировать дальний и ближний порядок в системе.

Коэффициент диффузии D , задаваемый, по определению, как

$$\dot{n} = -D \frac{\partial n}{\partial x}$$

можно оценить, используя соотношение Эйнштейна:

$$D = \frac{1}{2d \cdot t} \left\langle |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \right\rangle. \quad (23)$$

При оценке свойств переноса важное значение имеют автокорреляционные функции. Так, коэффициент диффузии можно определить при помощи автокорреляционной функции скорости $Z(t)$. Предположим, что в начальный момент времени частица i имеет скорость $v_i(0)$. Тогда в отсутствии взаимодействия с другими частицами скорость будет оставаться постоянной, т.е. максимально коррелированной с начальной скоростью. Взаимодействие с другими частицами будет ослаблять эту корреляцию. Определение $Z(t)$ имеет вид:

$$Z(t) = \langle \mathbf{v}_i(t) \cdot \mathbf{v}_i(0) \rangle, \quad (24)$$

тогда коэффициент диффузии можно определить из соотношения

$$D = \frac{1}{d} \int_{-\infty}^{\infty} Z(t) dt. \quad (25)$$

Соотношение (25) есть пример общей связи между коэффициентами переноса и соответствующими автокорреляционными функциями.

Для определения температуры плавления можно использовать критерий Линдемманна, согласно которому плавление происходит при достижении средней амплитудой теплового движения атомов некоторой критической величины:

$$\langle (\vec{u})^2 \rangle^{1/2} / a = f, \quad (26)$$

где u - смещение атома из положения равновесия, a - расстояние между ближайшими атомами. Для кристаллов, описываемых взаимодействием Ван-дер-Ваальса величина f составляет ~ 0.15 .

Контрольные вопросы:

- 1) Перечислите основные типы упаковки, характерные для кластеров.
- 2) Перечислите основные типы кластеров.
- 3) Сформулируйте основные принципы метода молекулярной динамики.
- 4) Проведите сравнение основных схем численного интегрирования, используемых в методе МД.
- 5) Какой тип взаимодействия описывает потенциал Леннарда-Джонса?
- 6) Возможно ли моделирование кристалла кремния с межатомным взаимодействием, заданным потенциалом Леннарда-Джонса?
- 7) В чем заключается отличие метода МД при моделировании микроканонического и канонического ансамблей?
- 8) Какие параметры моделируемой системы позволяют оценить классический и квантовомеханический методы МД?

4. Программный пакет HyperChem 6.0.

Программа HyperChem позволяет моделировать поведение сложных атомных и молекулярных систем с использованием классических и квантовомеханических потенциалов межчастичного взаимодействия. Возможно использование следующих видов вычислений: оптимизация структуры при помощи минимизации потенциальной энергии

взаимодействия, вычисление потенциальной энергии взаимодействия для заданной геометрии, расчет траекторий совокупности частиц методами молекулярной динамики, динамики Ланжевена, Монте-Карло.

При использовании классического потенциала межчастичного взаимодействия программа вычисляет среднюю температуру, потенциальную, кинетическую и полную энергии системы. Все промежуточные результаты, включая координаты и скорости атомов, могут быть сохранены в Snapshot-файл и использованы для дополнительного анализа (формат Snapshot-файла – в Приложении 1).

Использование квантовомеханического потенциала взаимодействия дополнительно позволяет рассчитывать энергию и конфигурацию молекулярных орбиталей, рассчитывать электростатический потенциал, спектры поглощения.

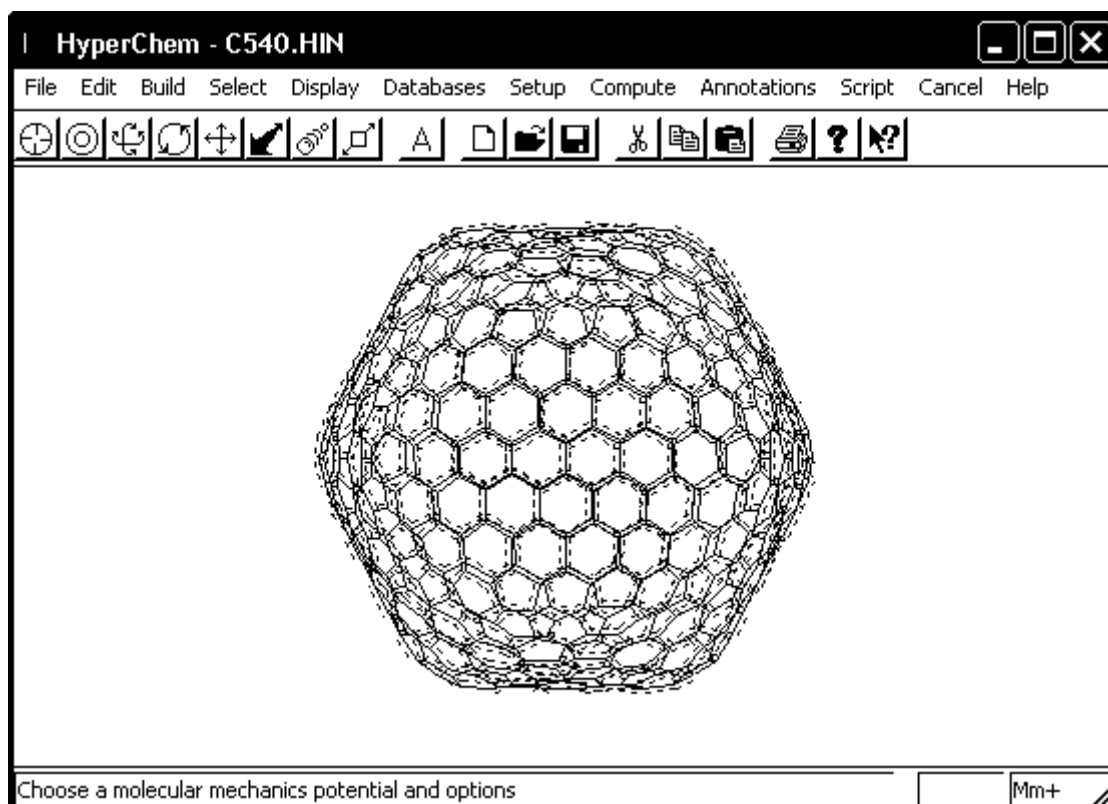


Рис.8. Главное окно программы HyperChem

Программа HyperChem позволяет создавать моделируемые системы как с использованием графического инструментария, так и с помощью текстовых .hin файлов специального формата (Приложение 2). В составе пакета имеются данные о структуре некоторых аминокислот, нуклеиновых кислот, полимеров, а также о структуре ряда кристаллических решеток. Программа может импортировать данные в формате .pdb.

Встроенные языки программирования HyperChem Command Language (Hcl) и Tool Command Language (Hcl) позволяют пользователю существенно расширить возможности программы, реализуя собственные алгоритмы обработки получаемых результатов.

На программной панели (рис.8) размещен ряд кнопок: Draw – поместить атом или межатомную связь, Select – выбор атома. С помощью кнопок Rotate и Translate изображение можно перемещать и вращать. Magnify – изменение масштаба. Эти действия можно совершать и через меню Edit.

В меню Build/Default element выбирается химический элемент, атомы которого будут использованы. Также здесь можно просмотреть характеристики этого элемента.

Меню Databases позволяет использовать содержащиеся в базе данных готовые структуры: аминокислоты, полимеры, нуклеиновые кислоты, кристаллические решетки.

Пункт Меню Databases/Crystals открывает окно Crystal Builder (рис.9), которое позволяет выбрать тип задаваемой кристаллической решетки и ее размеры. Возможно использование решеток, соответствующих конкретным химическим элементам и соединениям (кнопка Samples...). Отображение выбранной решетки в главное окно программы осуществляется операцией Put меню HyperChem окна Crystal Builder.

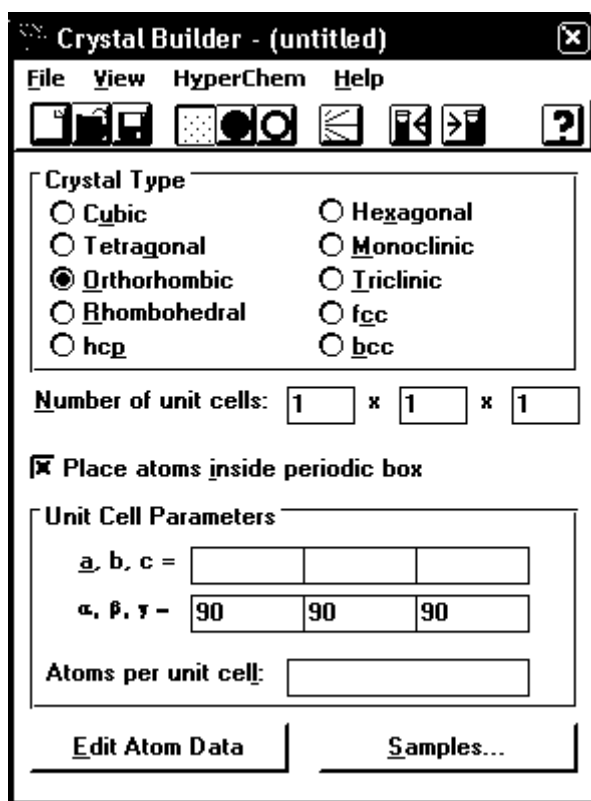


Рис.9. Меню Databases/Crystals

В пункте Setup главного меню осуществляется выбор между тремя методами задания межчастичного потенциала: классическим (molecular mechanics), квантовомеханическим методом «из первых принципов» (ab initio) и полуэмпирическим квантовомеханическим методом (semi-empirical). Для каждого метода предусмотрены наиболее распространенные типы потенциалов межатомного взаимодействия. Основными методами являются классический и полуэмпирический. Классический метод обеспечивает наиболее быстрые вычисления, однако не позволяет рассчитывать электронные состояния системы, которые способен рассчитывать полуэмпирический метод.

При выборе полуэмпирического потенциала необходимо задать ряд параметров в меню Semi-empirical/Options... (рис.10). Представленное на рисунке окно соответствует всем потенциалам, кроме потенциала Extended

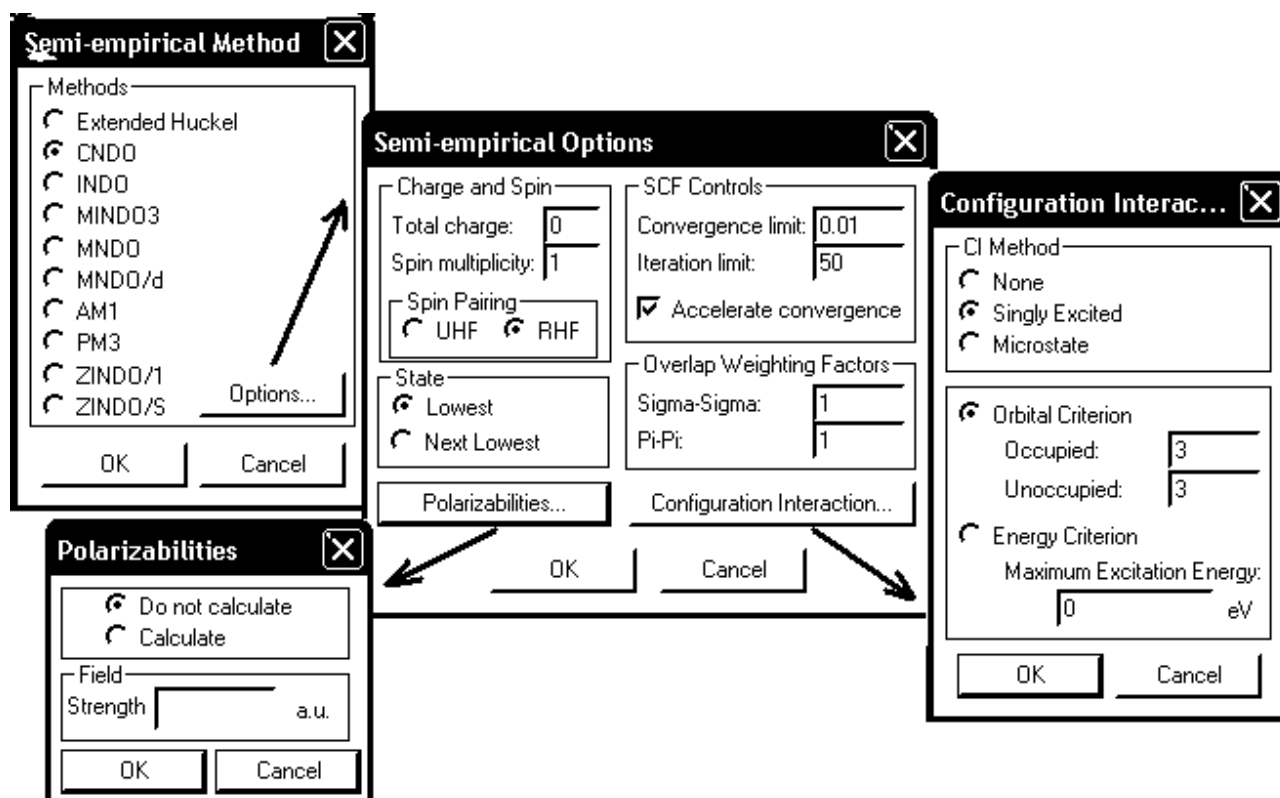


Рис.10. Меню Setup/Semi-empirical.

Huckel, который реализует метод вычисления потенциала MO-LCAO и имеет более узкий спектр возможностей. Наиболее важным параметром окна Semi-empirical Options является Spin multiplicity, изменение которого может потребоваться для возможности дальнейших расчетов. Системы с четным количеством электронов имеют в основном состоянии полный спин, равный нулю. Нулевой спин может быть ориентирован единственным образом, что соответствует значению параметра multiplicity, равному 1. В случае нечетного количества электронов полный спин равен 1/2. В этом случае возможны две ориентации спина и параметр multiplicity должен равняться 2. Остальные значения этого параметра соответствуют возбужденным состояниям с не спаренными электронами.

Для того, чтобы была доступна функция вычисления спектра поглощения (пункт меню Compute/Electronic Spectrum), необходимо в окне

Semi-empirical Options выбрать опцию Configuration Interaction и задать CI метод, отличный от None.

Для моделирования водных растворов при помощи пункта меню Setup/Periodic Box... можно задать размеры области, заполненной молекулами воды, а также минимальное расстояние между молекулами воды и атомами растворенного вещества.

После выбора потенциала возможно выполнение моделирования: расчет энергии для единственной текущей конфигурации атомов выполняется при помощи пункта меню Compute/Single Point. Моделирование динамики осуществляется при помощи пунктов меню Molecular Dynamics, Langevin Dynamics и Monte Carlo. Предварительно можно произвести оптимизацию геометрии структуры, которая состоит в поиске конфигурации, отвечающей минимуму потенциальной энергии (пункт меню Compute/Geometry Optimization...).

В меню молекулярной динамики (рис.11) задаются времена нагрева (Heat time) и охлаждения (Cool time) системы, время симуляции (Run time), а также соответствующие им температуры. Шаг интегрирования Step size должен обеспечивать сохранение полной энергии при моделировании микростатического ансамбля. Обычно используется шаг интегрирования 0.01 – 0.001 пс. Панель Options позволяет задать периодические граничные условия (Periodic boundary conditions) или моделирование в вакууме (In vacuo). Опция «Constant temperature» позволяет производить моделирование при постоянной температуре (т.е. использовать канонический ансамбль).

С помощью кнопки Averages этого меню можно вывести окно, определяющее термодинамические параметры системы, которые должны графически отображаться во время МД моделирования (рис.12). Возможно отображение кинетической, потенциальной и полной энергии системы (EKIN, EPOT, ETOT), температуры (TEMP), а также их

среднеквадратичных отклонений ($D E_{KIN}, \dots, D T_{EMP}$). Для вывода на экран динамики межатомных расстояний или химических связей необходимо выделить при помощи кнопки Select интересующие атомы или химическую связь и задать имя в пункте меню Select/Name Selection...

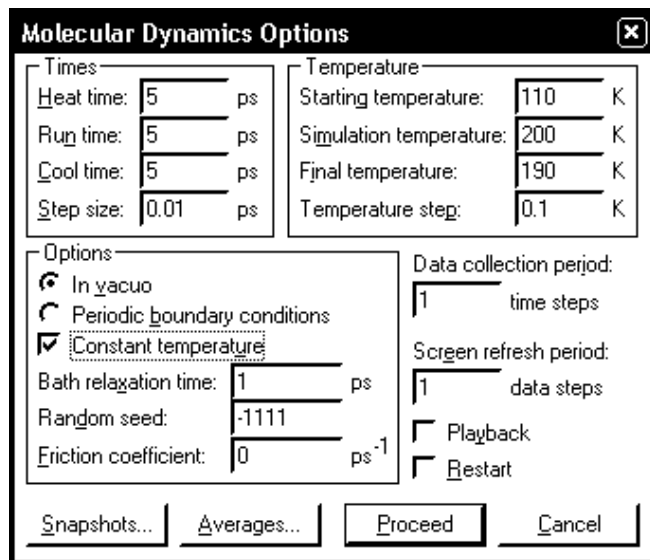


Рис.11. Меню Compute/Molecular dynamics

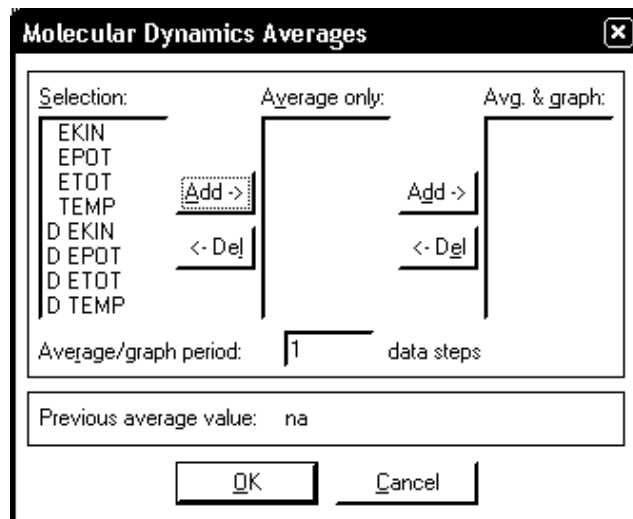


Рис.12. Окно Compute/Molecular/Averages Dynamics.

Для сохранения результатов моделирования необходимо при помощи кнопки Snapshots... задать имя файла, в который будут записываться результаты моделирования.

Кнопка Proceed служит для начала процесса моделирования. Если предварительно был открыт сохраненный ранее Snapshot-файл и установлен флажок Playback, то на экране будут отображены результаты моделирования, содержащиеся в Snapshot-файле.

После выполнения одного из перечисленных методов моделирования становятся доступными остальные пункты меню Compute, такие как Orbitals, Electronic Spectrum и др. Пункт меню Orbitals позволяет отобразить энергетические уровни системы (рис.13), а также отобразить

конфигурации молекулярных орбиталей при помощи кнопки Plot (рис.14). На рисунке приведен пример для молекулы фуллерена C₆₀ (.hin файлы с примерами различных структур находятся в папке «Папка HyperChem»\Samples).

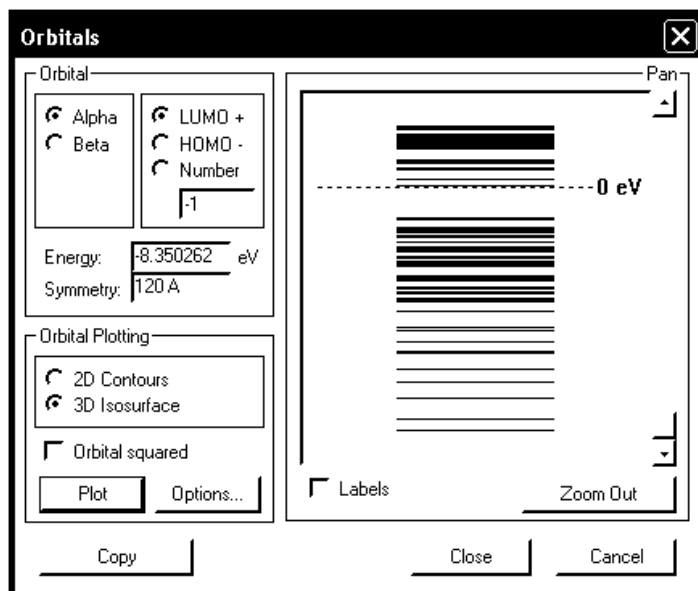


Рис.13. Окно Orbitals.

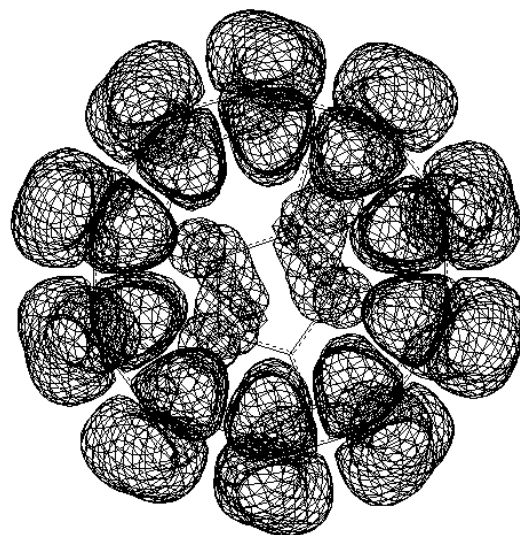


Рис.14. Молекулярные орбитали фуллерена C₆₀.

5. Практические задания

Работа 1. Моделирование структуры икосаэдрического кластера аргона.

Используя данные, приведенные в Приложении 2, написать .hin файл, задающий икосаэдрический кластер аргона, состоящий из 13 атомов.

Работа 2. Изучение температурной стабильности кластера аргона.

Провести МД моделирование для кластера аргона, полученного в Работе 1, в интервале температур 1-100 К. Результаты моделирования сохранить в файл. Используя сохраненные данные, построить зависимость

среднего квадрата относительной флуктуации длины связи от температуры. Определить температуру плавления кластера.

Работа 3. Динамика системы кластеров аргона.

Написать .inp файл, задающий систему из 3-5 икосаэдрических кластеров аргона. Провести МД-моделирование при температуре ниже температуры плавления. Объяснить полученные результаты.

Работа 4. Максвелловское распределение по скоростям атомов в кристалле аргона.

Провести МД моделирование кристаллической решетки аргона, используя следующие параметры:

- классический потенциал;
- размер системы 3х3х3 элементарные ячейки;
- продолжительность эксперимента 30 пс;
- шаг интегрирования 0.01 пс;
- моделирование при постоянной температуре.

Моделирование провести для температур в диапазоне 10-200 К. Результаты сохранить в SnapShot файлы. Построить распределение атомов по скоростям и определить массу атомов аргона. Результаты расчетов сравнить с табличными данными.

Работа 5. Определение температуры плавления кристаллической решетки аргона по критерию Линдемана.

Используя SnapShot файлы, полученные в Работе 4, построить график зависимости средней амплитуды теплового движения атомов от температуры и определить температуру плавления аргона по критерию Линдемана.

Работа 6. Расчет энергетических уровней фуллерена.

Используя различные полуэмпирические потенциалы взаимодействия, рассчитать положение энергетических уровней для молекул фуллеренов C₆₀, C₈₀, C₁₈₀. Сравнить полученные результаты. Можно ли говорить о зонной структуре изучаемых систем?

Приложение 1. Структура Snapshot-файлов

Двоичные Snapshot-файлы содержат три раздела:

- 1) Заголовок фиксированной длины, содержащий основные параметры моделирования;
- 2) Заголовок, описывающий все атомы структуры;
- 3) Сохраняемые данные.

Первый заголовок содержит следующие данные

Тип	Адрес	Описание
int	0-3	Число отсчетов в файле
int	4-7	Смещение (в байтах) первой записи, содержащей координаты и скорости
int	8-11	Количество атомов
int	12-15	Период сохранения данных
	16-19	Зарезервировано
Boolean	20-23	True, если при вычислениях налагаются геометрические ограничения на длину связей, углы изгибов и т.п
int	24-27	Метод геометрической оптимизации

	28-47	Зерезервировано
Boolean	48-51	True, если использованы периодические граничные условия
Boolean	52-55	True при моделировании канонического ансамбля
real	56-59	Время релаксации температуры (пс)
	60-63	Зарезервировано
Boolean	64-67	True, если предварительно сохраненные значения скоростей используются при рестарте
int	68-71	Число для генератора случайных чисел
real	72-75	Размер базовой ячейки по X (Å)
real	76-79	Размер базовой ячейки по Y (Å)
real	80-83	Размер базовой ячейки по Z (Å)
	84-95	Зарезервировано
real	96-99	Начальная температура (К)
real	100-103	Максимальная температура (К)
real	104-107	Минимальная температура (К)
real	108-111	Продолжительность нагрева (пс)
real	112-115	Продолжительность моделирования (пс)
real	116-119	Продолжительность охлаждения (пс)
real	120-123	Шаг интегрирования (пс)
real	124-127	Шаг изменения температуры (К)
	128-159	Зарезервировано
int	160-163	Период сохранения данных (в шагах интегрирования)
int	164-167	Режим вывода сообщений
int	168-167	Количество атомов

Далее идут поля, описывающие все атомы структуры. Следующая секция повторяется для каждого атома:

Тип	Адрес	Описание
int	0-3	Индекс атома (начиная с 0)
int	4-7	Атомный номер (0-103)
int	8-11	Тип атома
	12-15	Зарезервировано
boolean	16-19	True, если атом фиксирован
	20-23	Зарезервировано
int	24-27	Координационное число (12)
int	28-31	Индекс 1-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	32-35	Индекс 2-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	36-39	Индекс 3-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	40-43	Индекс 4-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	44-47	Индекс 5-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	48-51	Индекс 6-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	52-55	Индекс 7-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	56-59	Индекс 8-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	60-63	Индекс 9-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	64-67	Индекс 10-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	68-71	Индекс 11-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
int	72-75	Индекс 12-го соседнего атома (-1 при отсутствии)
real	76-79	Заряд
real	80-83	X-координата

real	84-87	Y-координата
real	88-91	Z-координата
real	92-95	Масса

После описания всех атомов на каждом шаге сохраняются следующие данные (смещение первого байта этой секции относительно начала файла содержится в байтах 4-7):

- последовательно, для каждого атома, сохраняются координаты и скорости на текущем временном шаге:

Тип	Адрес	Описание
real	0-3	X-координата
real	4-7	Y-координата
real	8-11	Z-координата
real	12-15	X-компонента скорости (Å/пс)
real	16-19	Y-компонента скорости (Å/пс)
real	20-23	Z-компонента скорости (Å/пс)

- за блоком данных, содержащих координаты и скорости атомов, следует секция, содержащая информацию об энергии системы на текущем временном шаге:

Тип	Адрес	Описание
real	0-3	Полная энергия
real	4-7	Энергия растяжения/сжатия
real	8-11	Энергия изгиба
real	12-15	Энергия кручения
real	16-19	Энергия взаимодействия Ван-дер-Ваальса

	20-23	Зарезервировано
real	24-27	Энергия электростатического взаимодействия
	28-35	Зарезервировано
real	36-39	Энергия взаимодействия Ван-дер-Ваальса 1-4
real	40-43	Энергия электростатического взаимодействия 1-4
	44-63	Зарезервировано
real	64-67	Полуэмпирическая энергия связи
real	68-71	Полуэмпирическая энергия атома
real	72-75	Полуэмпирическая энергия электронов
real	76-79	Полуэмпирическая энергия ядра
real	80-83	Полуэмпирическая теплота образования
	84-103	Зарезервировано
real	104-107	Полный дипольный момент
real	108-111	X-компонента дипольного момента
real	112-115	Y-компонента дипольного момента
real	116-119	Z-компонента дипольного момента
real	120-123	Градиент
real	124-127	Температура (К)
real	128-131	Потенциальная энергия
real	132-135	Кинетическая энергия
	136-143	Зарезервировано
real	144-147	Истекшее время
	148-171	Зарезервировано

Приложение 2. Структура HIN-файлов

HIN файл состоит из записей, расположенных на отдельных строках. Каждая строка, за исключением комментариев, начинается с ключевого

слова. Строка комментариев начинается с разделителя < ; >. Полный синтаксис имеет следующий вид.

```
; <комментарии>*  
forcefield <имя потенциала взаимодействия>  
sys* <температура>  
seed* <число для генератора случайных чисел>  
view* <расстояние до начала координат> <масштаб> <расстояние  
до плоскости отсечки> <расстояние между плоскостями отсечки>  
<преобразование> ...<преобразование>  
box* <x> <y> <z>  
mol <номер молекулы> <имя молекулы>  
res* <номер молекулярного остатка> <имя остатка> <номер PDB>  
<номер предыдущего остатка> <номер следующего остатка>  
atom <номер атома> <имя атома> <элемент> <тип> <флаги>  
<заряд> <x> <y> <z> <координационное число> <номер соседнего атома  
связь >  
vel* <номер атома> <x> <y> <z>  
mass* <номер атома> <масса>  
basisset* <номер атома> <базис>  
atom ...  
vel* ...  
mass* ...  
basisset ...  
...  
endres * <номер молекулярного остатка>  
endmol <номер молекулы>  
selection* <номер выделенного участка> <атомы>
```

selectrestraint <флаг> <константа взаимодействия> <величина ограничения>*

Пример. HIN файл, описывающий структуру фуллерена.

```
;Buckminsterfullerene
forcefield mm+
sys 0
view 40 0.16201 55 15 1 0 0 0 1 0 0 0 1 5.2854 -6.5254 -53.283
mol 1 0
atom 1 - C CA - 0 -5.27056 7.75773 -4.97822 3 2 a 6 a 7 a
atom 2 - C CA - 0 -4.04863 8.24524 -4.48588 3 1 a 3 a 9 a
atom 3 - C CA - 0 -2.99271 7.35184 -4.20987 3 2 a 4 a 11 a
...
atom 60 - C CA - 0 -5.30023 5.29317 1.54354 3 35 a 30 a 34 a
endmol 1
```

Здесь использован потенциал взаимодействия mm+ (другие возможные значения amber, bio+, oplis). Тип химических связей: a - ароматическая связь (возможны также: s – одинарная связь, d – двойная связь, t – тройная связь).

Литература

1. В.Д.Лахно Кластеры в физике, химии, биологии. – Ижевск: изд-во РХД, 2001. – 256 с.
2. S. Maruyama Molecular dynamics method for microscale heat transfer / in “Advances in Numerical Heat Transfer”, ed. W.J.Minkowycz, E.M.Sparrow, Taylor&Francis, New York, 2000.
3. M.P.Allen Introduction to Molecular Dynamics Simulation // Computational Soft Matter: From Synthetic Polymers to Proteins, Vol. 23, 2004, <http://www.fz-juelich.de/nic-series/volume23>.
4. Д.В.Хеерман Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. – М.: Наука, 1990. – 176 с.
5. Х.Гулд, Я.Тобочник Компьютерное моделирование в физике. Часть 1. М.: Мир, 1990. – 349 с.
6. Б.М.Смирнов Плавление кластеров с парным взаимодействием атомов // УФН, том 164, №11, 1994. – С.1165-1185.
7. HyperChem Release 5.0 for Windows. Reference Manual / Hypercube, Inc. 1996.

Учебное издание

МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОКЛАСТЕРОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Учебно-методическое пособие

Составители:

Богатиков Евгений Васильевич,
Битюцкая Лариса Александровна,
Шебанов Александр Николаевич

В авторской редакции

Подп. в печ. 13.12.12.2013. Формат 60×84/16.

Усл. печ. л. 2,4. Тираж 25 экз. Заказ 1302.

Издательско-полиграфический центр
Воронежского государственного университета.
394000, г. Воронеж, пл. им. Ленина, 10. Тел. (факс): +7 (473) 259-80-26
<http://www.ppc.vsu.ru>; e-mail: pp_center@ppc.vsu.ru

Отпечатано с готового оригинал-макета в типографии
Издательско-полиграфического центра
Воронежского государственного университета.
394000, г. Воронеж, ул. Пушкинская, 3. Тел. +7 (473) 220-41-33