**Моделирование состояния кристалла неона при низких температурах**

***Демченко М.А.***1***, Саватейкин Я.М.***1***, Каморзин Б.Б.***2

1*Студенты, 2 курс специалитета*

2*Инженер*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: max.d2006a@gmail.com, yaroslavsavateykin@yandex.ru, mr.kamorzin@yandex.ru*

Интерес исследователей к тематике матричной изоляции обусловлен как возможностью наблюдать квантовые состояния отдельных изолированных атомных и молекулярных систем, в том числе и нестабильных, так и перспективами использовать подобные системы в качестве элементов квантовых устройств (квантовые сенсоры, кубиты, атомные часы). На сегодняшний день изучение свойств молекул в экспериментах по матричной изоляции является активно развивающейся областью исследований. Одним из наиболее распространённых типов матриц являются матрицы на основе инертных газов, при этом квантовые эффекты в матрице уменьшаются в ряду неон-ксенон. Матрицы аргона, криптона и ксенона могут быть описаны в рамках сугубо классических подходов, и вклад квантовых эффектов ядерного движения в термодинамические функции и наблюдаемые относительно мал1. Матрица неона является пограничными случаем, с одной стороны, не являясь столь квантовым материалом, как гелий, но с другой стороны вклад квантовых эффектов в ее случае сопоставим с энергией межатомного взаимодействия неон-неон.

Целью настоящей работы является численное моделирование взаимодействий в кристалле неона и анализ термодинамических свойств, в том числе энергии когезии.2 В настоящей работе предложен комплексный подход к моделированию взаимодействий атомов неона, включающий расчет градиента и гессиана для оптимизации геометрии системы. Для анализа системы был написан код на языке Python для расчета функций градиента и гессиана; проведена оптимизация геометрии кластера с использованием градиентных методов; была исследована его стабильность, и осуществлено сравнение точности и устойчивости решений с использованием методов классической молекулярной динамики. Отдельное внимание было уделено исследованиям различным алгоритмам и выбор наиболее эффективного численного подхода к моделированию данной системы.

В результате проделанной работы были получены оценки энергии когезии, а также проведено сравнение с значениями, полученными из сопоставимой работы.3 Результаты расчетов подтвердили корректность алгоритмов: полная энергия системы сохранялась в пределах погрешности, обусловленной выбором шага интегрирования.

**Литература**

1. Kleshchina N. N. et al. Modeling of manganese atom and dimer isolated in solid rare gases: Structure, stability, and effect on spin coupling //The Journal of Physical Chemistry A. – 2017. – Т. 121. – №. 12. – С. 2429-2441.

2. Zheng X. R. A New Approach for Calculating Cohesive Energy of Solid Neon Based on the First Principles //Key Engineering Materials. – 2019. – Т. 807. – С. 128-134.

3. Halpern A. M. From dimer to crystal: calculating the cohesive energy of rare gas solids //Journal of Chemical Education. – 2012. – Т. 89. – №. 5. – С. 592-597.