

МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ В ЗАДАЧАХ РАДИАЦИОННОЙ ФИЗИКИ

З.А. Шарипов

*Лаборатория информационных технологий им. М.Г.Мещерякова
Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

1. Развитие моделей взаимодействия быстрых тяжелых ионов и нанокластеров с конденсированными средами

2. Вычислительные аспекты

3. Прикладные задачи: радиационная стойкость материалов

Механизмы образования структурных нарушений в материалах¹

Модель термического пика - латентные треки в материалах за счет локального повышения температуры

Модель ударных волн — разрушение кристаллической решетки за счет генерации ударной волны

Модель «кулоновского взрыва» - структурные дефекты за счет релаксации механических напряжений, вызванных кулоновским отталкиванием

¹Скуратов В.А. Применение пучков заряженных частиц для формирования и модификации свойств низкоразмерных структур//Плен.док. XII конф. ОМУС-2008, Дубна, ОИЯИ, 2008г.

Модели взаимодействия

- Модель термического пика (ТТМ)^{2,3}
- Метод молекулярной динамики (Модель ударных волн)
- Непрерывно-атомистическая модель⁴
- Модель кулоновского взрыва⁵

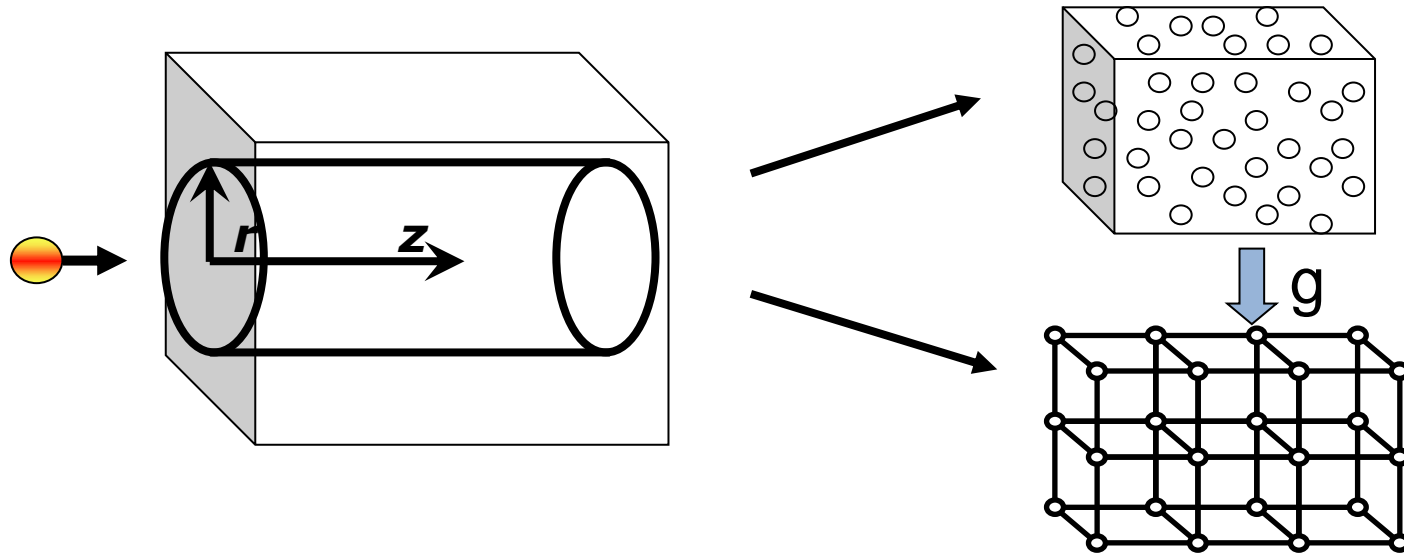
²Лифшиц И.М. и др.// Докл. АН СССР, 1956, т.109, № 6. с.1109-1111.

³Лифшиц И.М. и др.// Атомная энергия, 1959, т.6, с.391-402.

⁴D.S.Ivanov, L.V.Zhigilev.. Phys.Rev.B.68.064114(2003).

⁵Рязанов А.И., Павлов С.А., Метелкин Е.В., Жемеров А.В. ЖЭТФ. 2005.Т.128. Вып. 1. С.139-149.

Модель термического пика



$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \text{div}(\lambda_e(T_e) \text{grad } T_e) - g(T_e)(T_e - T_i) + A_e(r, z, t)$$

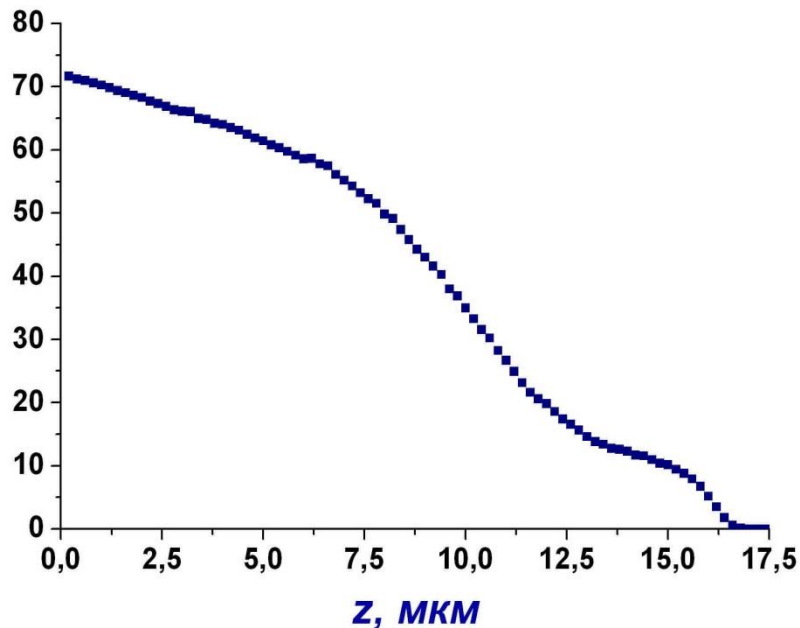
$$C_i(T_i) \frac{\partial T_i}{\partial t} = \text{div}(\lambda_i(T_i) \text{grad } T_i) + g(T_e)(T_e - T_i) + A_i(r, z, t)$$

$$A_{e,i}(r, z, t) \equiv b_{e,i} S_{inel,phonon}(z) \exp\left[-\frac{(t - t_0 - t(z))^2}{2\sigma_{t,e,i}^2}\right] \exp\left(-\frac{r}{r_{0,e,i}}\right)$$

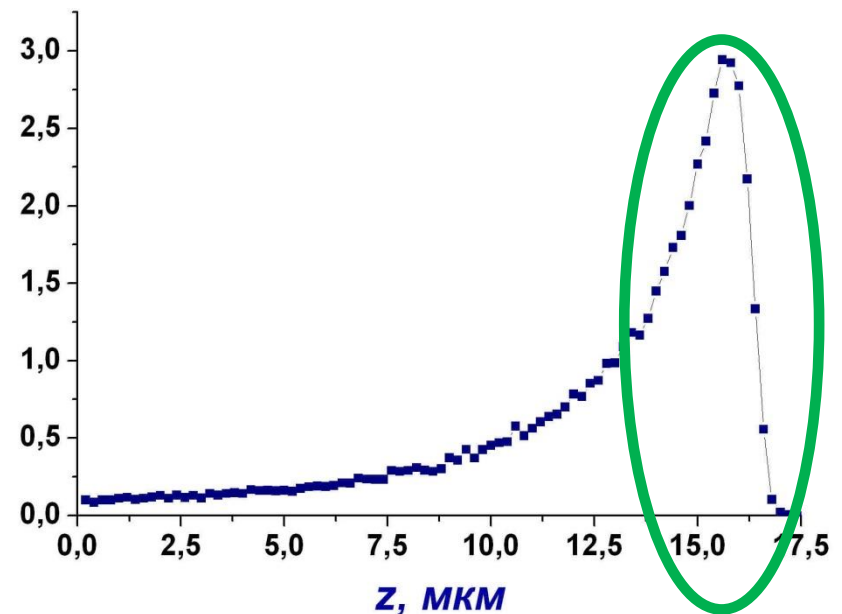
Облучение материалов тяжелыми ионами высоких энергий

Ni + Ur (700 МэВ)

$S_{inel}(z)$, MeB/мкм



$S_{phonon}(z)$, MeB/мкм

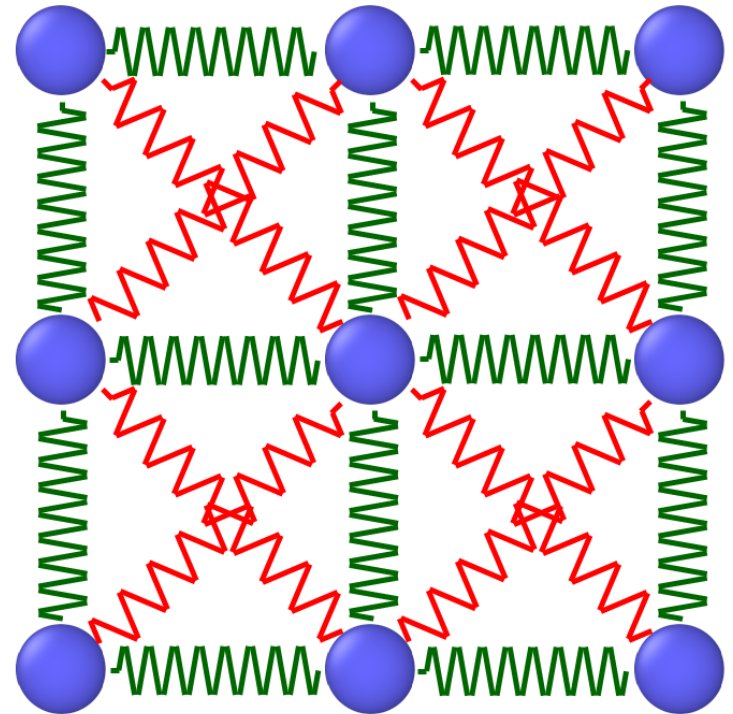


Зависимость удельных ионизационных потерь энергии $S_{inel}(z)$ и потери энергии на возбуждение фоновых колебаний $S_{phonons}(z)$ ионов урана с энергией 700 МэВ от глубины в никеле(SRIM-2012).

Метод молекулярной динамики

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = \vec{f}_i \quad (1 \leq i \leq N)$$

$$\vec{f}_i = - \frac{\partial U(r_1^{\vec{r}}, \dots, r_N^{\vec{r}})}{\partial r_i} + \vec{f}_i^{ex}$$



+ программные пакеты (LAMMPS, DL_POLY и т.д.)

+ структура, температура, давление, и т.д.

± ресурсоемкость (!)

Метод Верле

$$\vec{f}_i = -\vec{\nabla}_i \sum_j U(r_{ij})$$

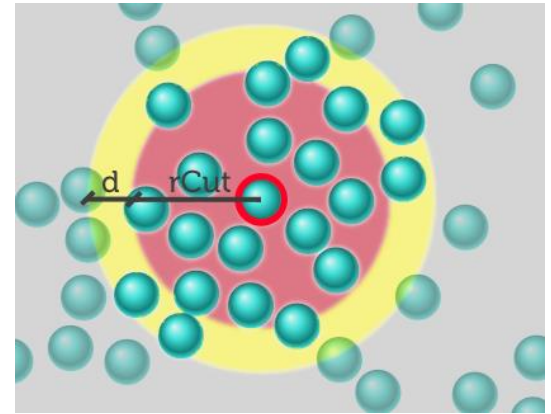
$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta t + \frac{a_i(t)}{2}\Delta t^2$$

$$a(t + \Delta t) = \frac{f(t + \Delta t)}{m}$$

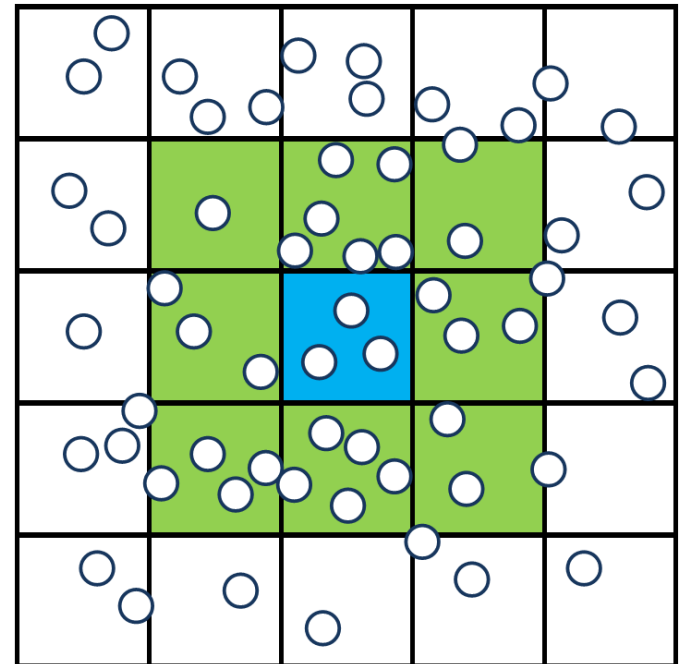
$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{a(t + \Delta t) + a(t)}{2}\Delta t$$

⁷ Verlet L. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules. // Phys. Rev.-1967.- v.159 N.1- p.98-103.

Список Верле
(Verlet neighbor list algorithm)
 $O(N*N)$



Метод связанных ячеек
(Cell Linked-Lists algorithm)
 $O(N)$



Непрерывно-атомистическая модель

$$C_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_e(T_e) \frac{\partial T_e}{\partial z} \right) - G(T_e - T_l) + S(z, t), \quad \text{TMM}$$

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i + \xi m_i \mathbf{v}_i^T, \quad \text{MD}$$

$$\xi = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n G V_N (T_e^k - T_l) \bigg/ \sum_i m_i (\mathbf{v}_i^T)^2$$

⁸ D.M.Duffy and A.M.Rutherford, J. Phys.: Condens. Matter, 19, 016207-016218 (2007).

⁹ A.M.Rutherford and D.M.Duffy, J. Phys.: Condens. Matter, 19, 496201-496210 (2007).

¹⁰ J.Chen, D.Tzou and J.Beraun, Int. J. Heat Mass Transfer, 49, 307-316 (2006).

¹¹ G.E.Norman, S.V.Starikov, V.V.Stegailov et al., Contrib. Plasma Phys., 53, 129-139 (2013).

¹² V.V.Pisarev and S.V.Starikov, J. Phys.: Condens. Matter, 26, 475401 (2014).

Используемые программы

LAMMPS –

Молекулярно-динамическое
моделирование

([1] <https://www.lammps.org/>)

OVITO – визуализация и др.

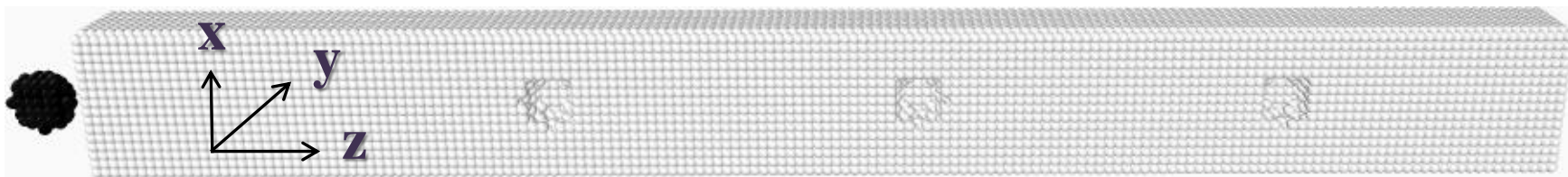
([2] <https://www.ovito.org/>)

¹³ Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. 117. 1-19.

¹⁴ Stukowski A. “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool”, Modeling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012.)

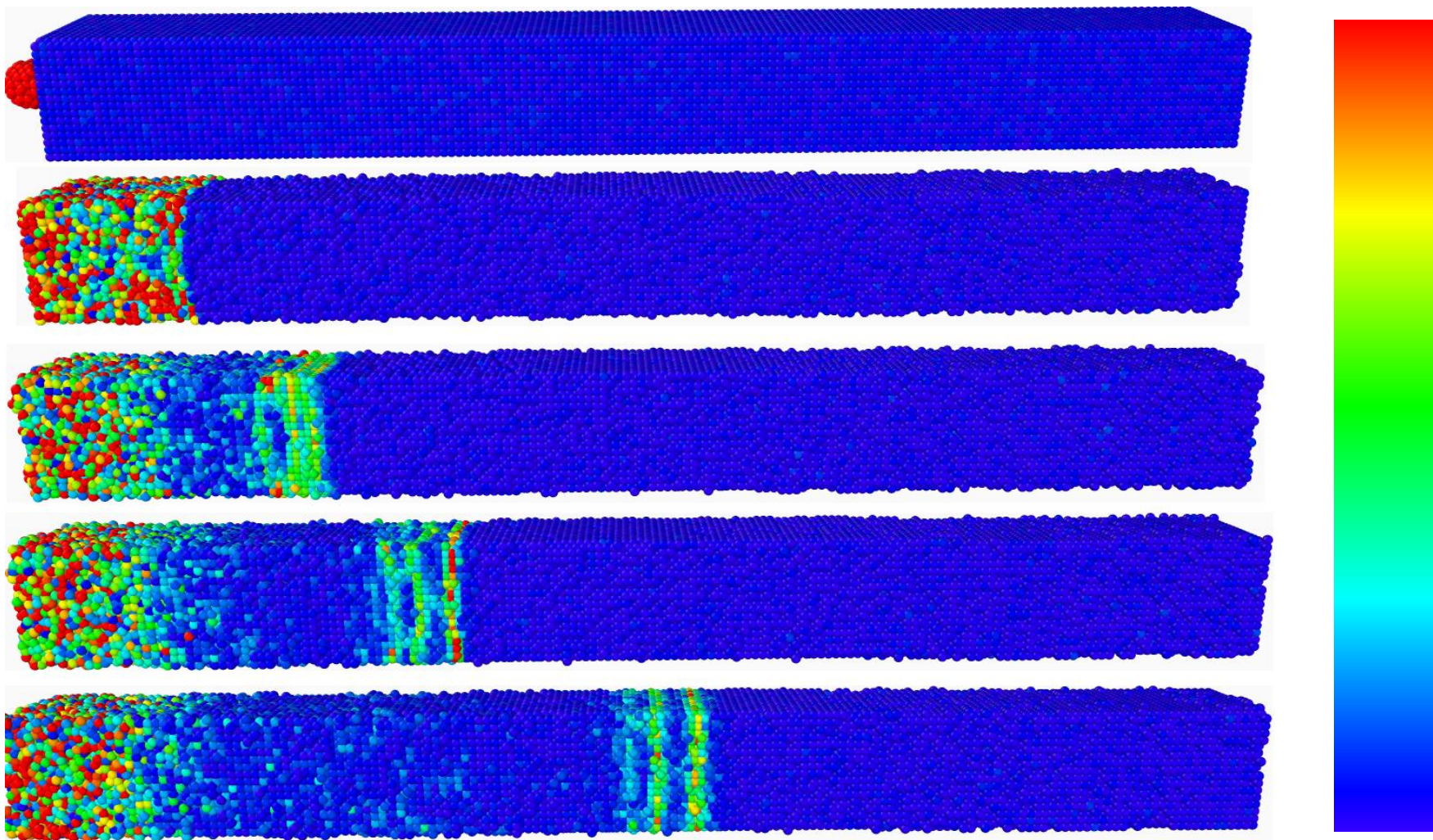
Параметры моделируемой системы :

Нанокластер:	W, Cu(Ø 1.5 нм, 2нм)
Энергия нанокластера:	10-100 eV/atom
Мишень:	W, Cu
Размер мишени:	5×5×50 нм (~110.000 частиц)
Потенциал:	ZBL < 0.5Å < EAM (Циглера-Бирзака-Литтмарка) (Модель погружённого атома)
Дефекты:	Ø 1.5 нм (на глубине 16, 28 и 41 нм)
Граничные условия:	p p s (периодическими граничными условиями по оси x и y)



Исходный образец мишени в **разрезе** с заданными дефектами типа пор с размерами **1.5 нм**. Стрелками указаны расположения пор .

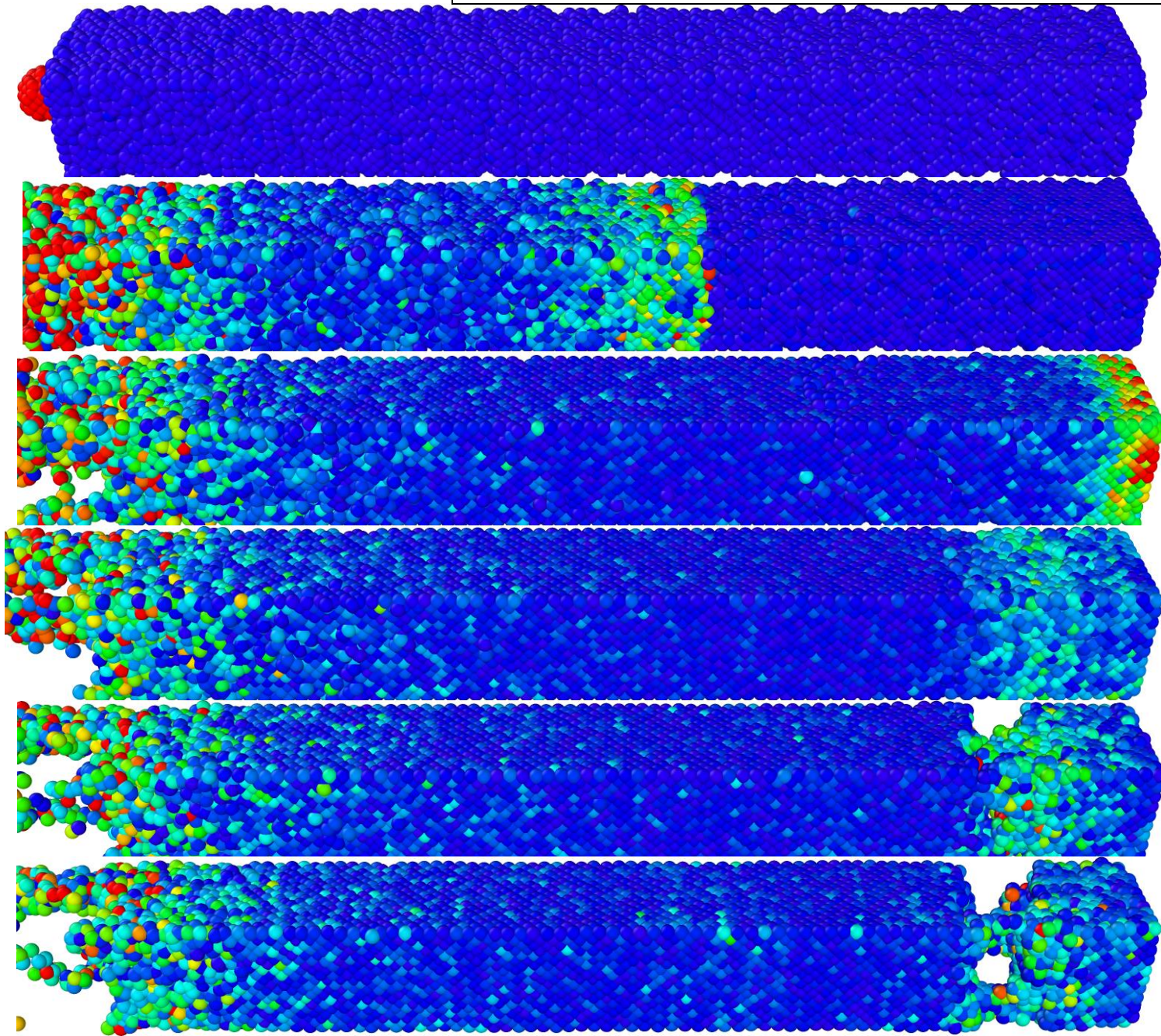
Результаты



Формирование и динамика ударной волны в мишени при облучении нанокластером вольфрама с энергией 50эв/атом в моменты времени 0пс (1), 0.5пс (2), 2пс (3), 3пс (4) и 10пс (5).

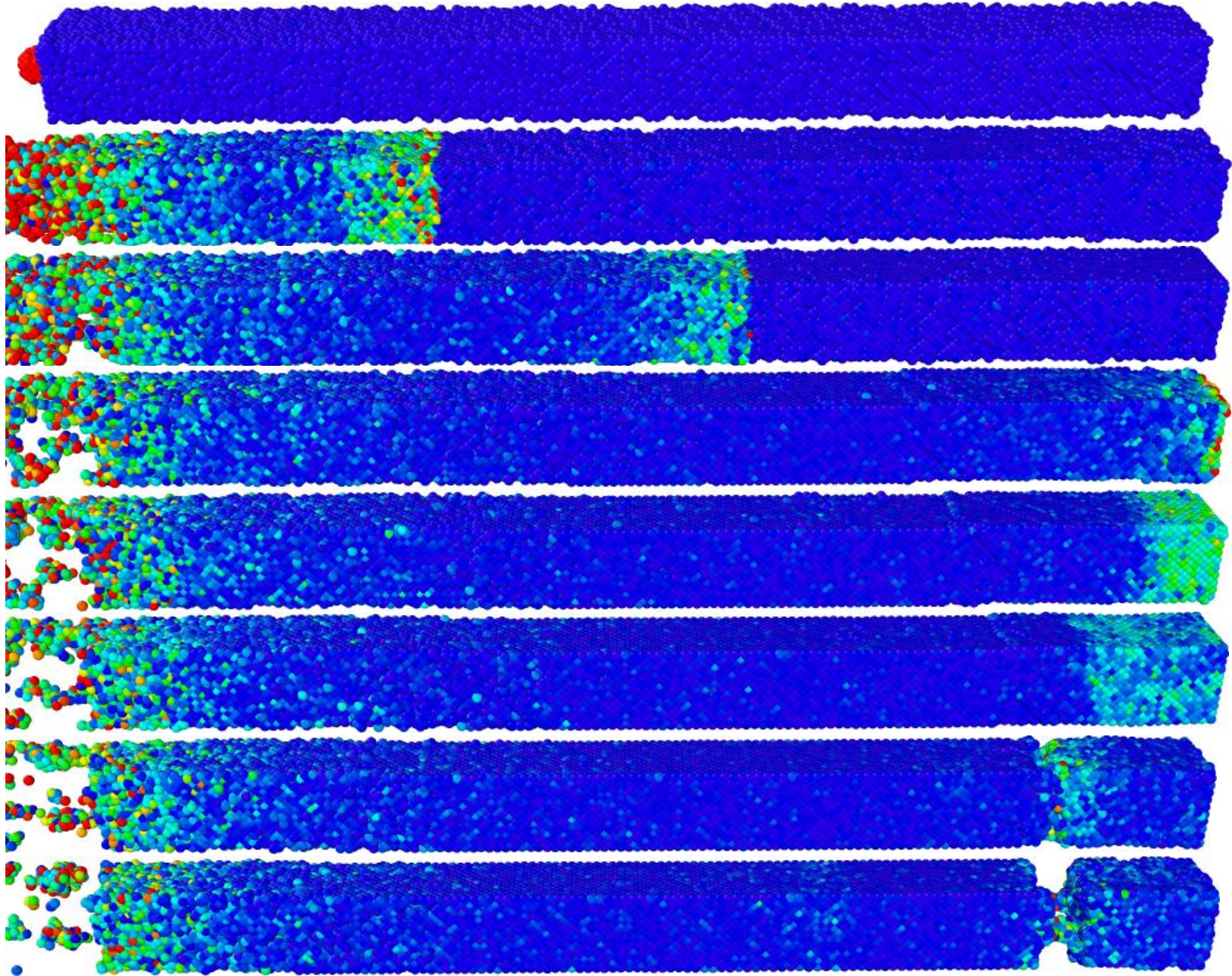
Результаты

$E_{cl}=100$ эв/атом, $3.6 \times 3.6 \times 32$ нм

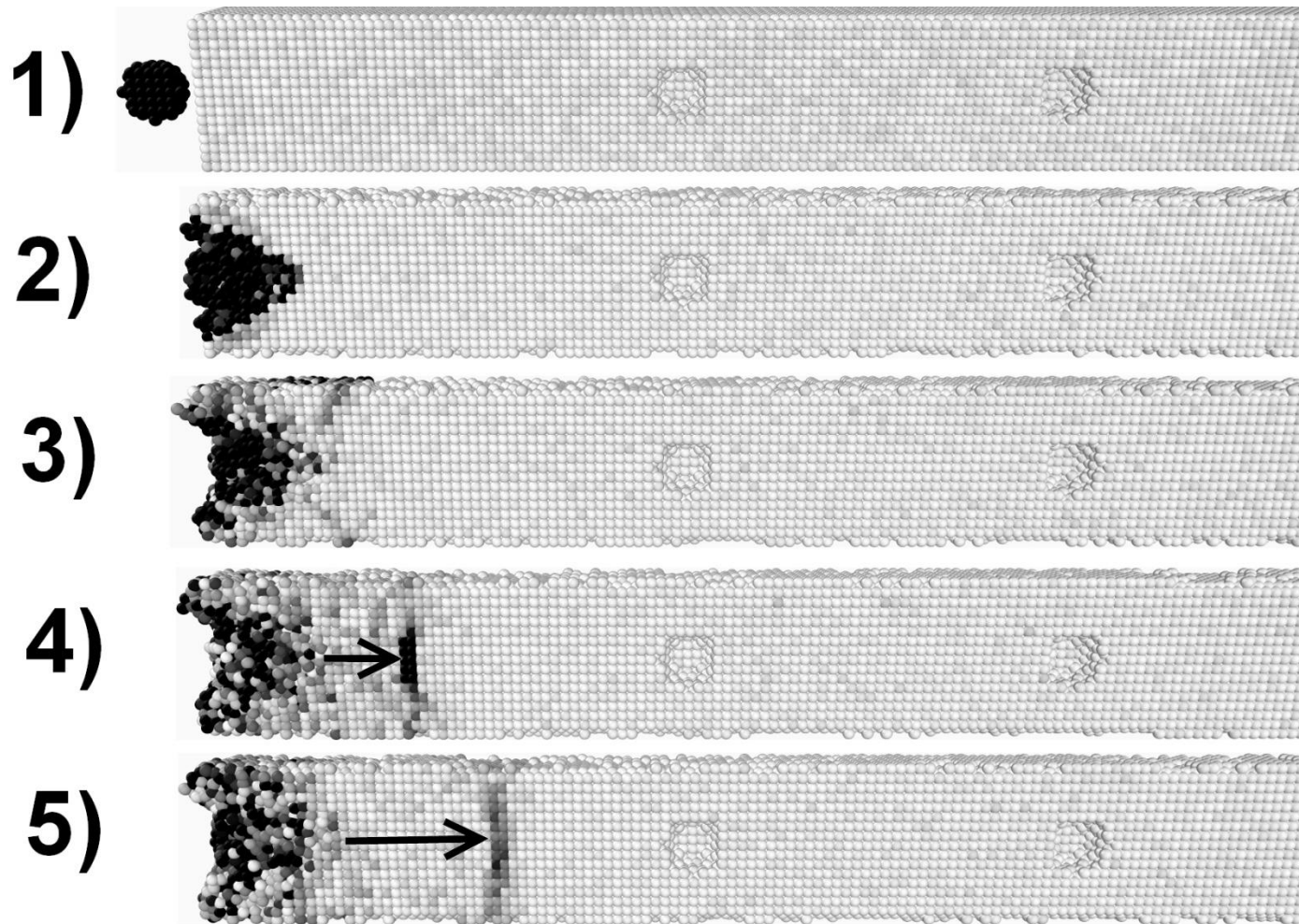


Результаты

$E_{cl}=100$ эв/атом, $3.6 \times 3.6 \times 51$ нм

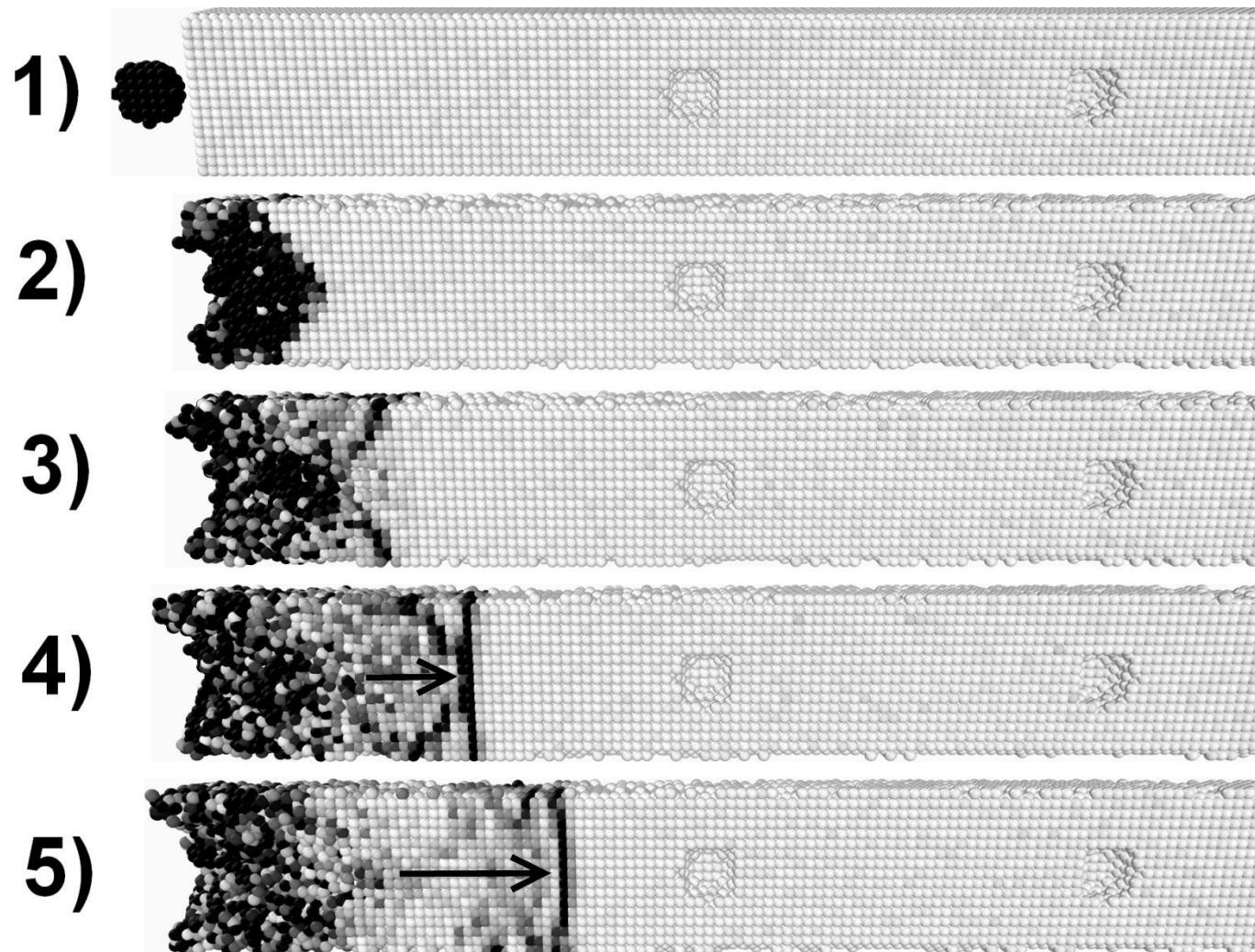


Результаты



Формирование и динамика ударной волны в мишени при облучении нанокластером вольфрама с энергией 30эв/атом в моменты времени 0пс (1), 0.5пс (2), 1пс (3), 1.5пс (4) и 2пс (5). Стрелкой указана ударная волна и её движение в мишени.

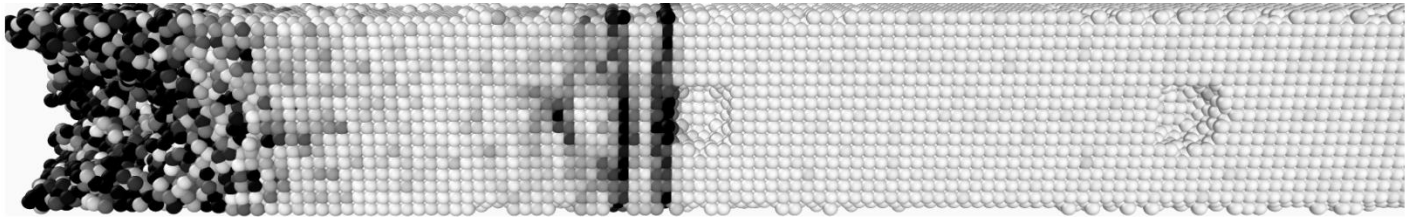
Результаты



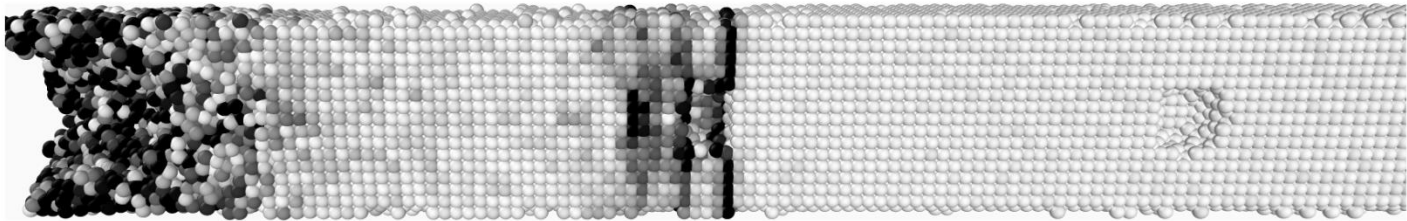
Формирование и динамика ударной волны в мишени при облучении нанокластером вольфрама с энергией 80эв/атом в моменты времени 0пс (1), 0.5пс (2), 1пс (3), 1.5пс (4) и 2пс (5).

Результаты

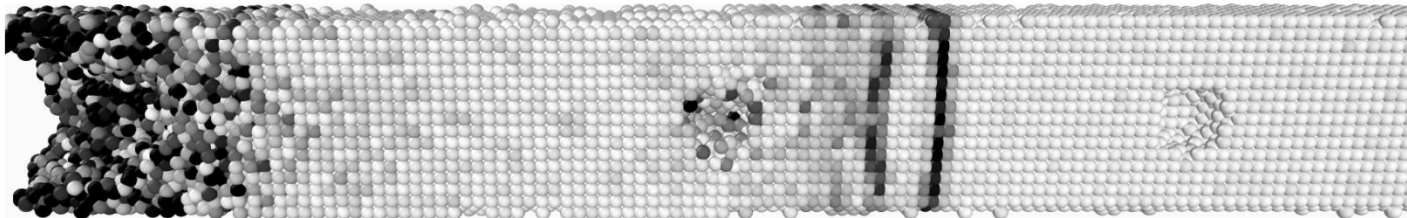
1)



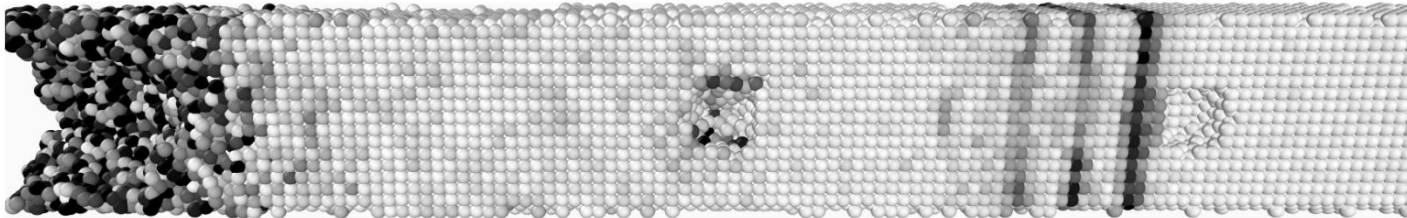
2)



3)

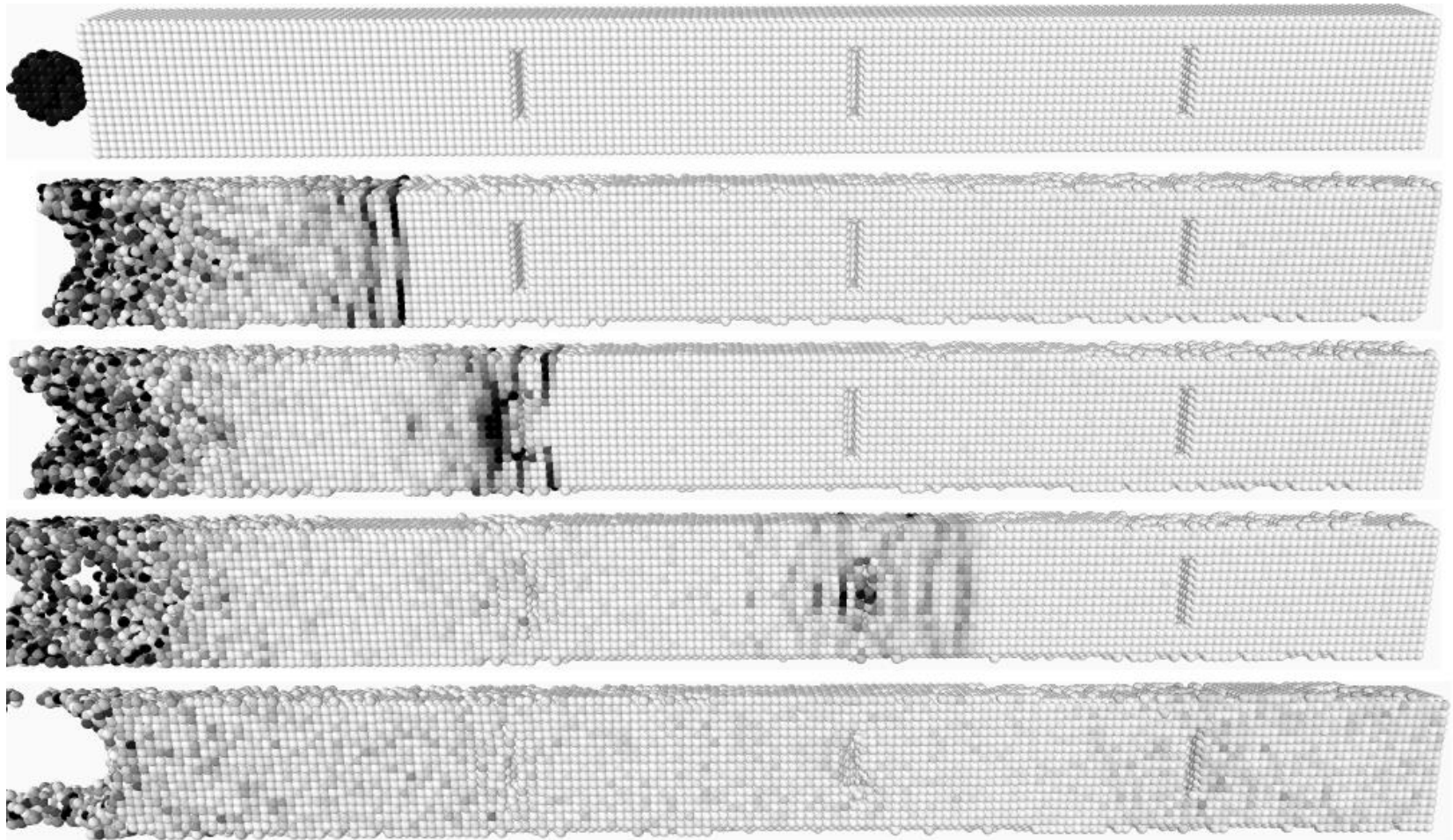


4)



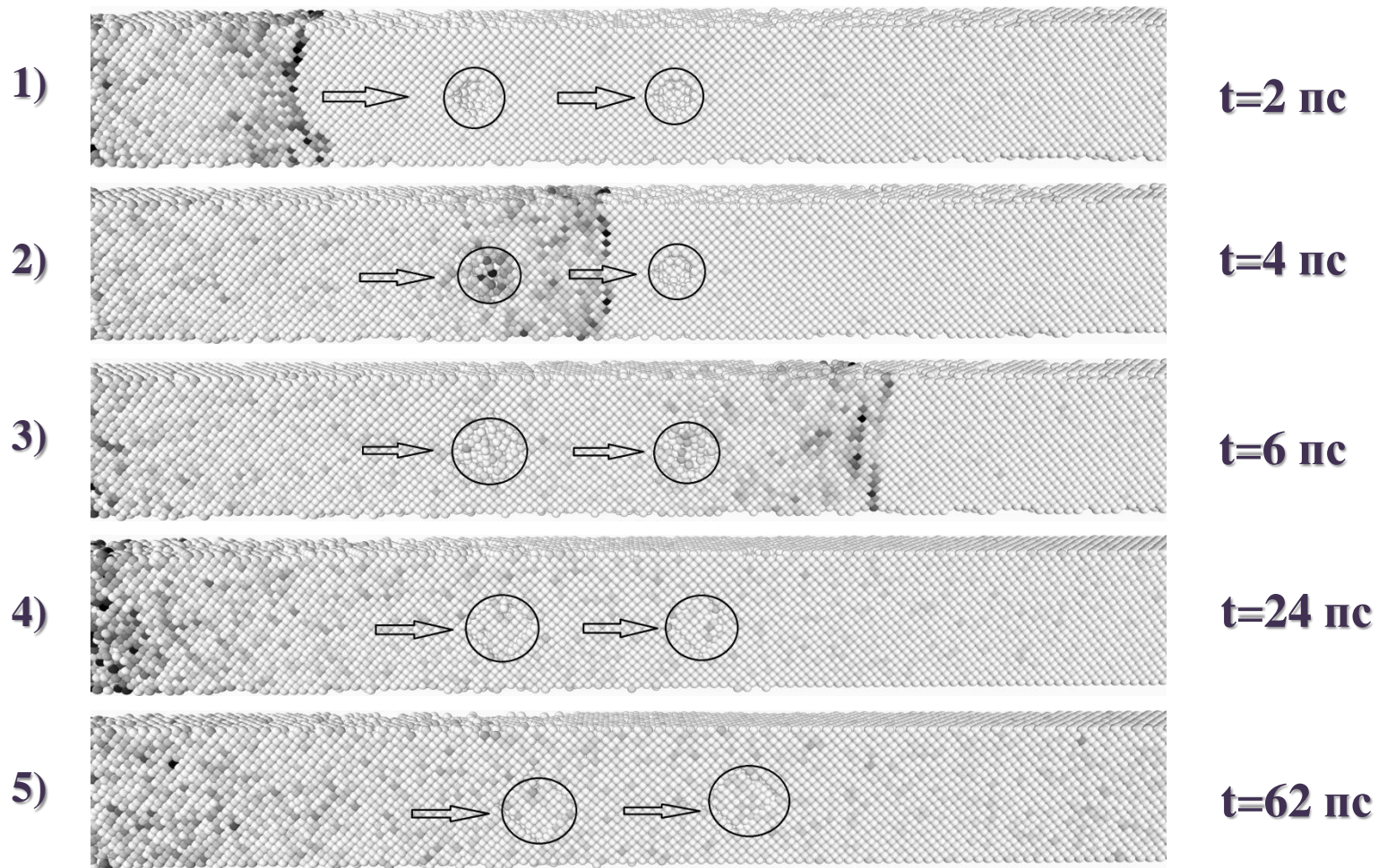
Прохождение ударной волны через дефекты мишени при облучении нанокластером вольфрама с энергией 80эв/атом в моменты времени 5,4, 6, 8,10 пс.

Результаты



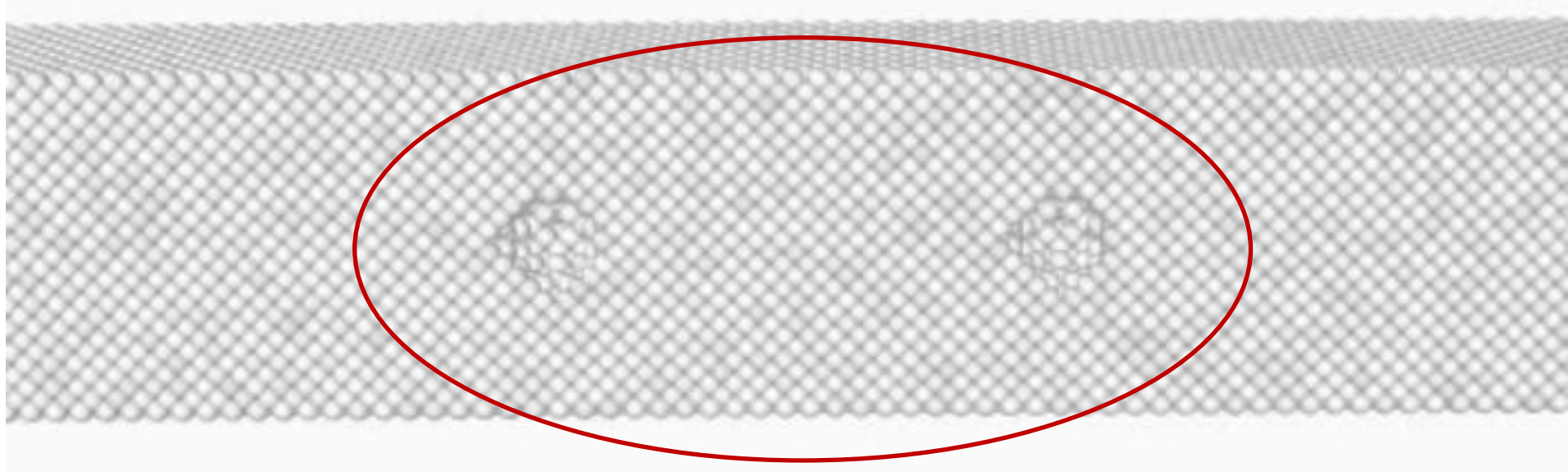
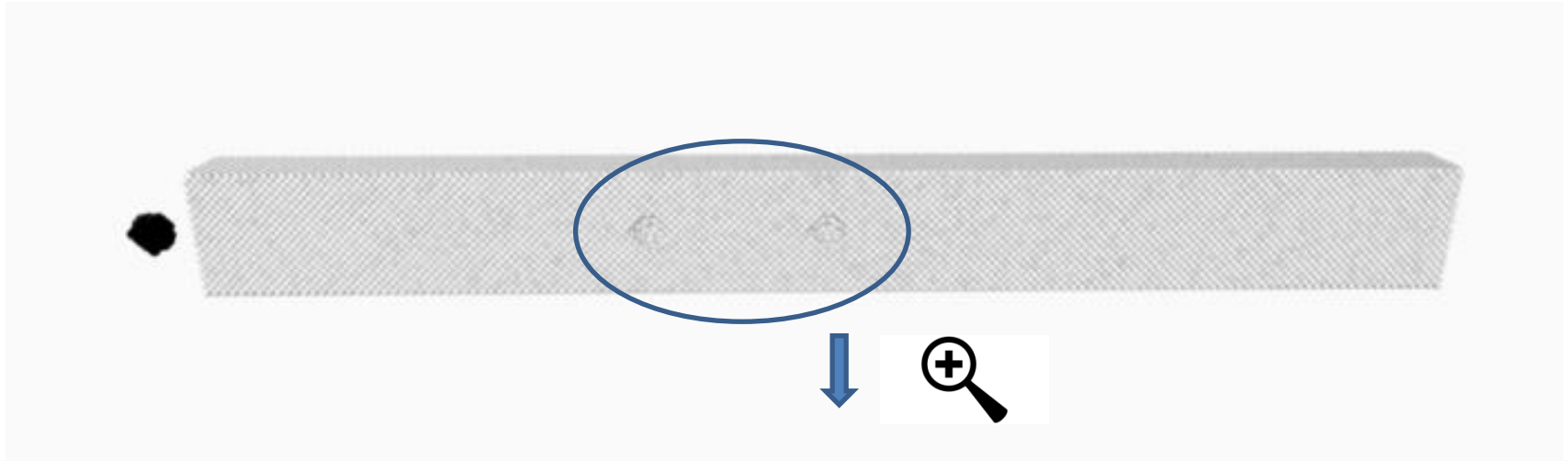
Влияние ударной волны на дефекты мишени при облучении нанокластером вольфрама с энергией 50эв/атом в моменты времени 0, 1, 1.5, 3, 10 пс.

Сравнение с Si+Si



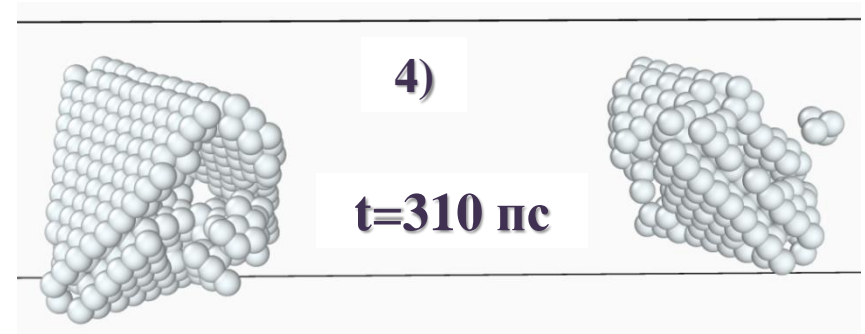
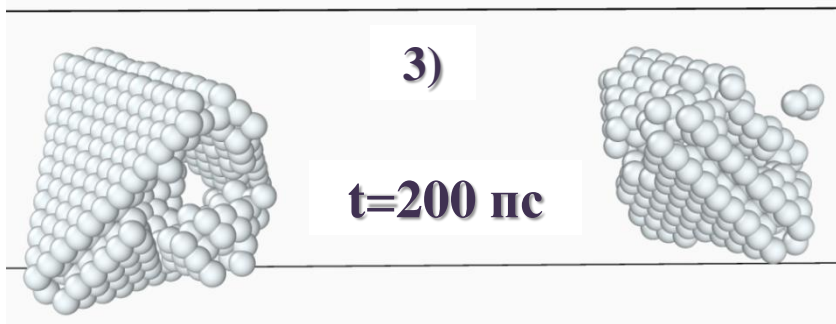
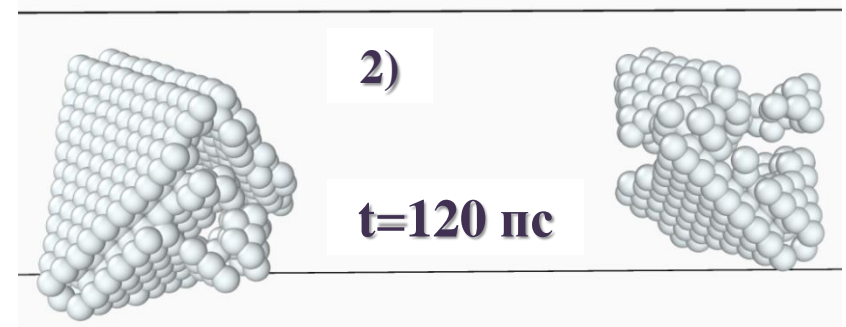
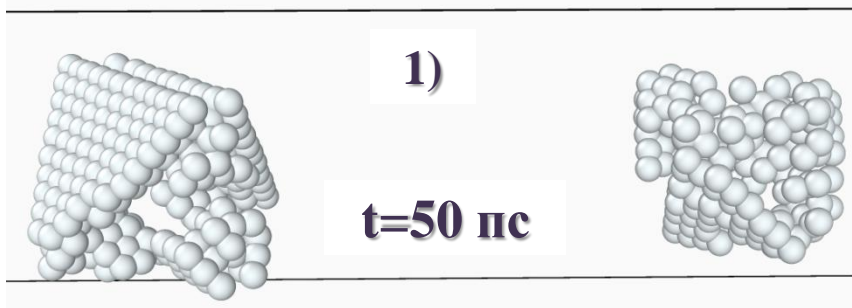
Динамика ударной волны в разрезе мишени в моменты времени 2 пс, 4 пс, 6 пс, 24 пс и 62 пс при облучении нанокластером с энергией 100 эв/атом. Стрелками указаны расположения пор и направления облучения.

Сравнение с Si+Si



Динамика ударной волны в разрезе мишени в моменты времени 2 - 62 пс при облучении нанокластером с энергией 100 эв/атом.

Сравнение с Си+Си



ГПУ-решетки, образованные вследствие ударной волны в окрестности поры мишени в моменты времени 50 пс - 310 пс при облучении нанокластером с энергией 100 эв/атом.



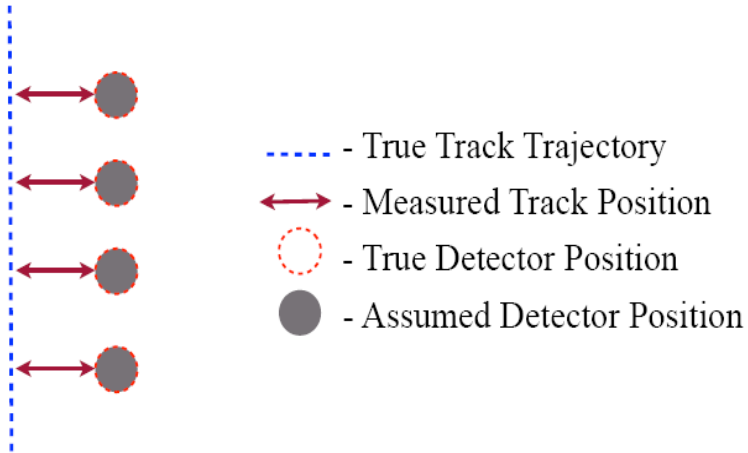
MESHCHERYAKOV
LABORATORY of
INFORMATION
TECHNOLOGIES



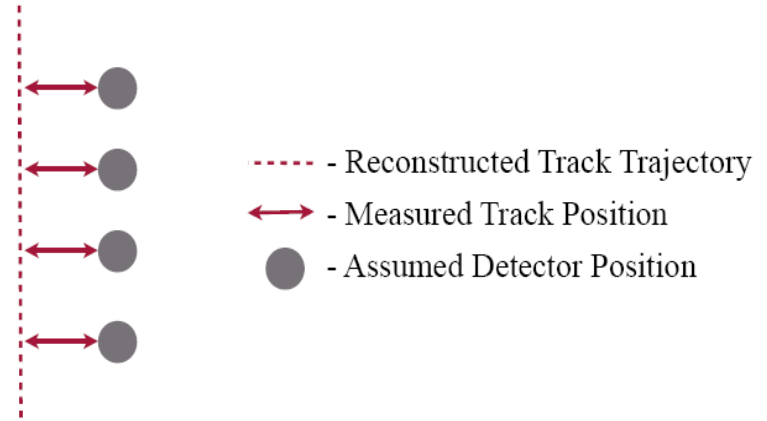
Geometry alignment for Silicon and GEM detectors of the BM@N experiment

Zarif Sharipov

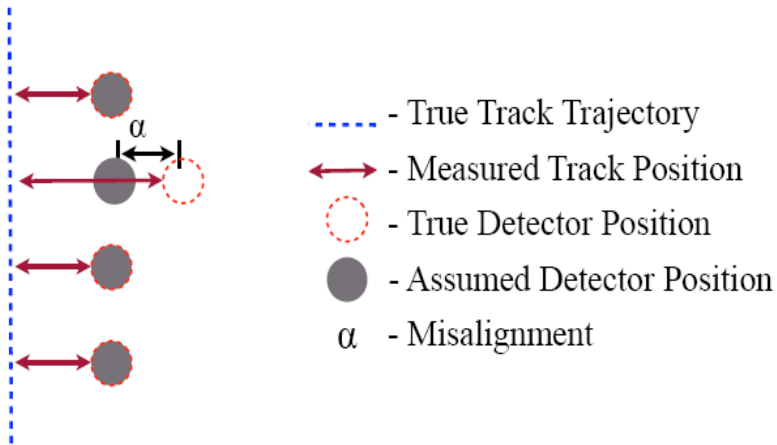
Introduction to Alignment



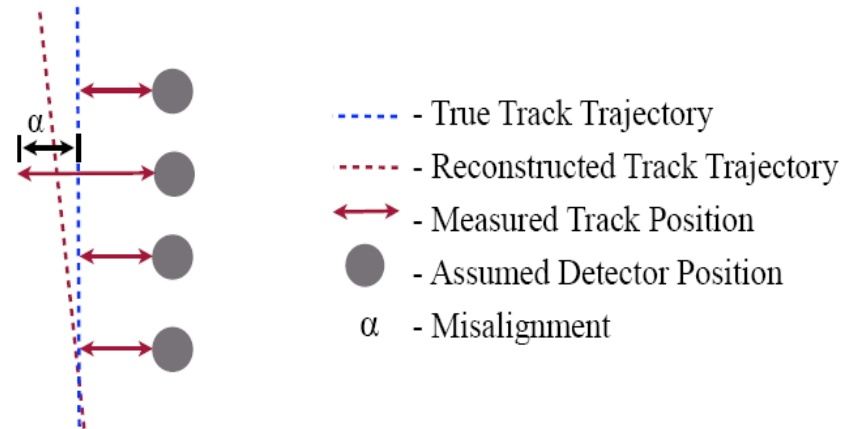
- True Track Trajectory
- Measured Track Position
- True Detector Position
- Assumed Detector Position



- Reconstructed Track Trajectory
- Measured Track Position
- Assumed Detector Position

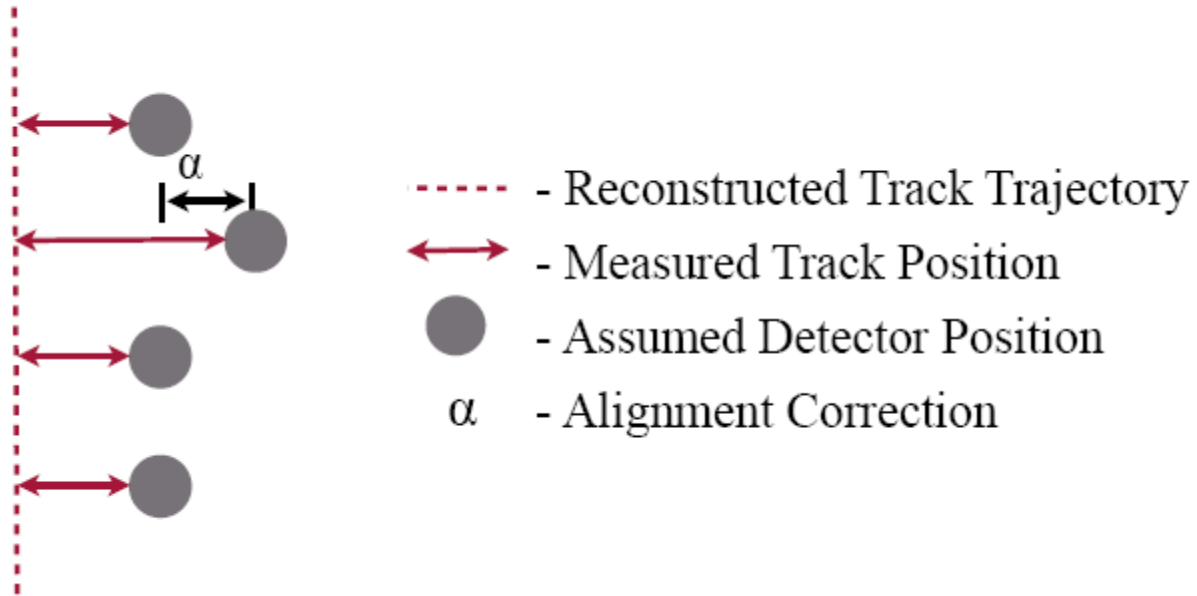


- True Track Trajectory
- Measured Track Position
- True Detector Position
- Assumed Detector Position
- α - Misalignment

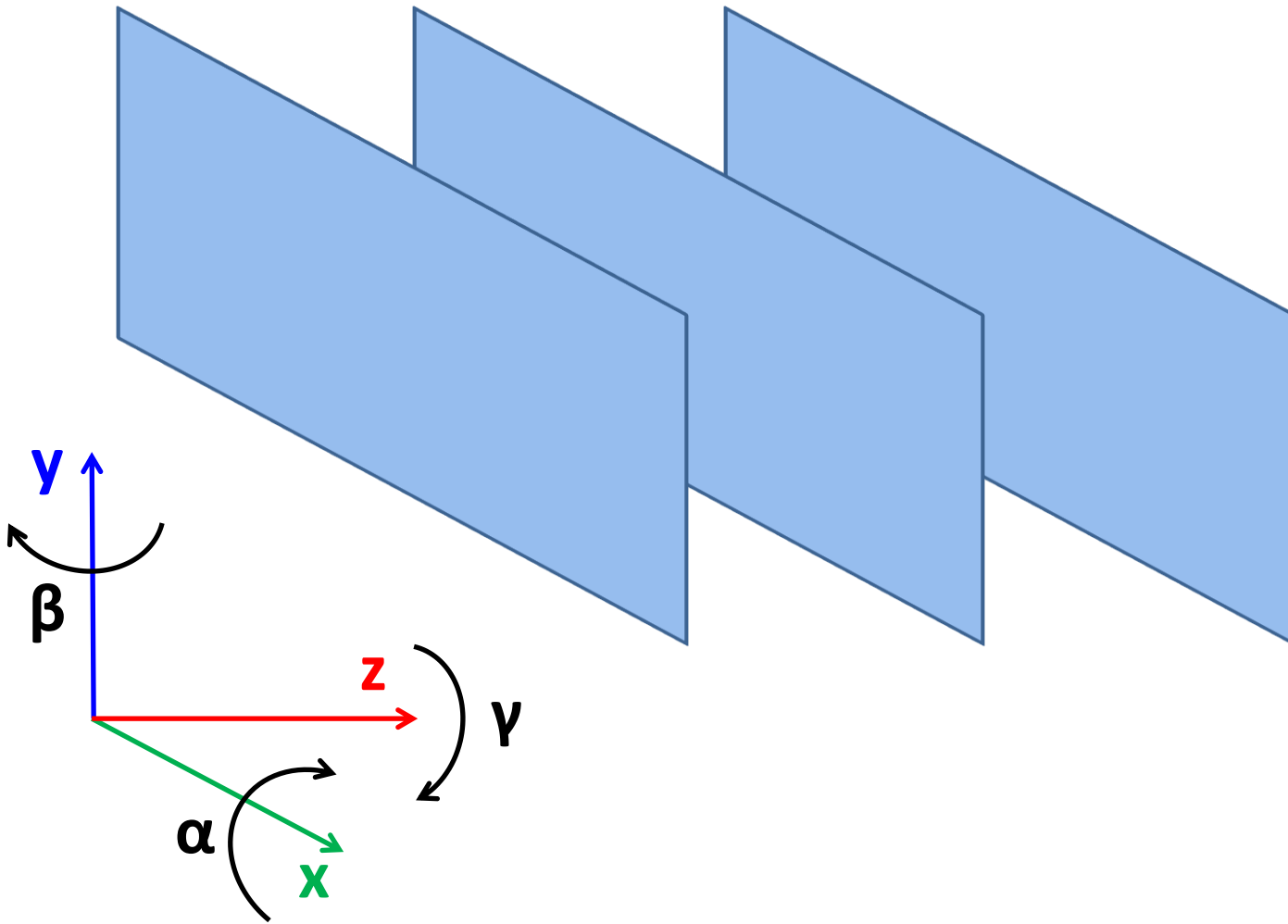


- True Track Trajectory
- Reconstructed Track Trajectory
- Measured Track Position
- Assumed Detector Position
- α - Misalignment

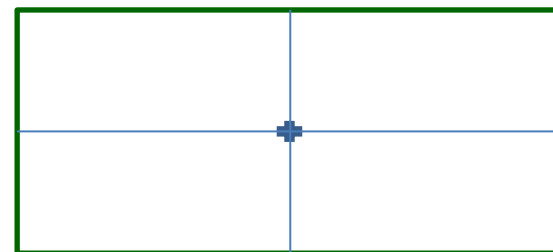
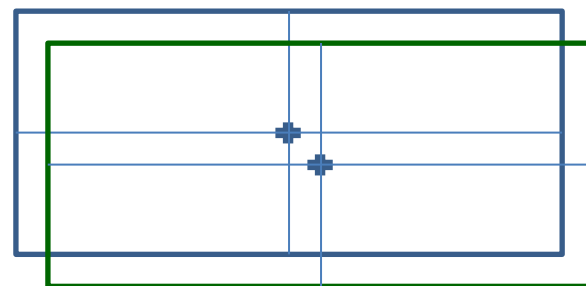
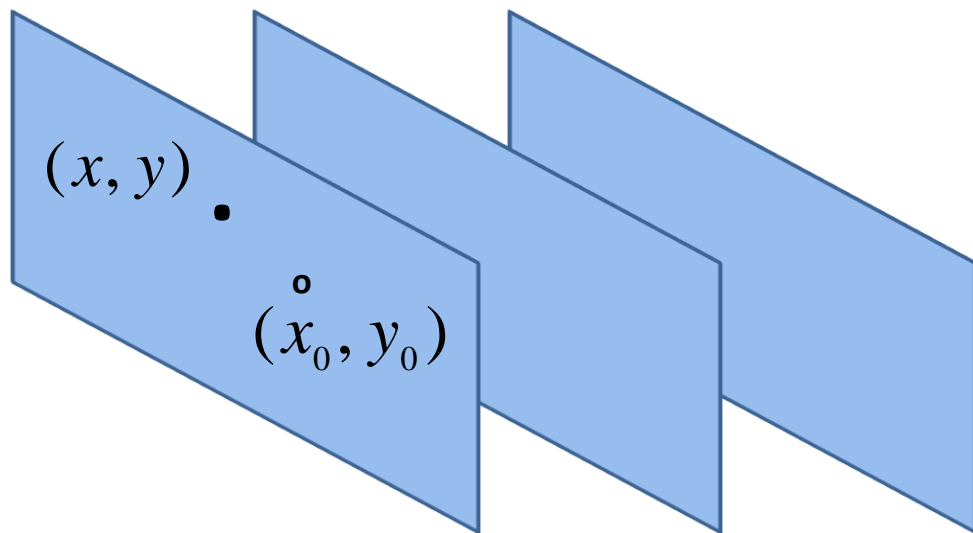
Introduction to Alignment



Introduction to Alignment



Introduction to Alignment



$$\Delta S^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$$

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{n_{track}} \sum_{j=1}^{n_{det}} \frac{[\Delta S_{ij}(u_{ij}, \alpha_i^t, \alpha_j^a)]^2}{\sigma_j^2}$$

Alignment for x and y

$$\Delta S = x - x_0$$

$$x = A_x z + B_x$$

$$\Delta S = A_x z + B_x - x_0 - dx$$

$$\Delta S_{ij} = u_{ij} - A_i z - B_i + du_j$$

$$\alpha_i = A_i, \quad i = 1, \dots, n_{tr}$$

$$\alpha_i = B_i, \quad i = n_{tr} + 1, \dots, 2n_{tr}$$

$$\alpha_i = du_j, \quad i = 2n_{tr} + 1, \dots, 2n_{tr} + n_{det} - 2$$

$N_d = 6$ - number of detectors

$N_t = 5$ - number of tracks

$\alpha_1, \dots, \alpha_{10}$ - parameters of tracks

$\alpha_{11}, \dots, \alpha_{14}$ - alignment parameters
of the detectors

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$$

S_2 0 0 0 0 0 S_2 0 0 0 0 0 S_2 0 0 0 0 0 S_2 0 0 0 0 0 S_2	S_1 0 0 0 0 0 S_1 0 0 0 0 0 S_1 0 0 0 0 0 S_1 0 0 0 0 0 S_1	Z_2 Z_3 Z_4 Z_5 Z_2 Z_3 Z_4 Z_5 Z_2 Z_3 Z_4 Z_5 Z_2 Z_3 Z_4 Z_5 Z_2 Z_3 Z_4 Z_5
S_1 0 0 0 0 0 S_1 0 0 0 0 0 S_1 0 0 0 0 0 S_1 0 0 0 0 0 S_1	N_d 0 0 0 0 0 N_d 0 0 0 0 0 N_d 0 0 0 0 0 N_d 0 0 0 0 0 N_d	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
Z_2 Z_2 Z_2 Z_2 Z_2 Z_3 Z_3 Z_3 Z_3 Z_3 Z_4 Z_4 Z_4 Z_4 Z_4 Z_5 Z_5 Z_5 Z_5 Z_5	1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	N_t 0 0 0 0 N_t 0 0 0 0 N_t 0 0 0 0 N_t

1. Volker Blobel, Claus Kleinwort. A New method for the high precision alignment of track detectors (<https://arxiv.org/abs/hep-ex/0208021>)
2. https://www.desy.de/~kleinwrt/MP2/doc/html/draftman_page.html

Alignment for x, y and z

$$\Delta S_{ij}^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$$

$$x = A_x z + B_x, \quad y = A_y z + B_y$$

$$x = A_x(z + dz) + B_x$$

$$x = A_x z + A_x dz + B_x$$

$$x = (A_x^0 + dA_x)(z + dz) + B_x,$$

$$y = (A_y^0 + dA_y)(z + dz) + B_y$$

$$x = A_x^0 z + dA_x z + A_x^0 dz + dA_x dz + B_x$$

Alignment for x, y and z

dAx_i

Bx_i

dx_i

dz_i

S ₂ 0 0 0 0	S ₁ 0 0 0 0	Z ₂ Z ₃ Z ₄ Z ₅
0 S ₂ 0 0 0	0 S ₁ 0 0 0	Z ₂ Z ₃ Z ₄ Z ₅
0 0 S ₂ 0 0	0 0 S ₁ 0 0	Z ₂ Z ₃ Z ₄ Z ₅
0 0 0 S ₂ 0	0 0 0 S ₁ 0	Z ₂ Z ₃ Z ₄ Z ₅
0 0 0 0 S ₂	0 0 0 0 S ₁	Z ₂ Z ₃ Z ₄ Z ₅
S ₁ 0 0 0 0	N _d 0 0 0 0	1 1 1 1
0 S ₁ 0 0 0	0 N _d 0 0 0	1 1 1 1
0 0 S ₁ 0 0	0 0 N _d 0 0	1 1 1 1
0 0 0 S ₁ 0	0 0 0 N _d 0	1 1 1 1
0 0 0 0 S ₁	0 0 0 0 N _d	1 1 1 1
Z ₂ Z ₂ Z ₂ Z ₂ Z ₂	1 1 1 1 1	N _t 0 0 0
Z ₃ Z ₃ Z ₃ Z ₃ Z ₃	1 1 1 1 1	0 N _t 0 0
Z ₄ Z ₄ Z ₄ Z ₄ Z ₄	1 1 1 1 1	0 0 N _t 0
Z ₅ Z ₅ Z ₅ Z ₅ Z ₅	1 1 1 1 1	0 0 0 N _t

Ax ₁ ⁰ z ₂	Ax ₁ ⁰ z ₃	Ax ₁ ⁰ z ₄	...
Ax ₂ ⁰ z ₂	Ax ₂ ⁰ z ₃	Ax ₂ ⁰ z ₄	...
...
Ax ₁ ⁰	Ax ₁ ⁰	Ax ₁ ⁰	...
Ax ₂ ⁰	Ax ₂ ⁰	Ax ₂ ⁰	...
...
Σ _i Ax _i ⁰	0
0	Σ _i Ax _i ⁰
...	...	Σ _i Ax _i ⁰	...

Alignment for x, y and θ

$$\Delta S_{ij}^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$$

$$x = x' \cos \theta - y' \sin \theta,$$

$$y = x' \sin \theta + y' \cos \theta$$

$$x' = A_x z + B_x, \quad y' = A_y z + B_y$$

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!}, \quad \cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2!}, \quad x \ll 1$$

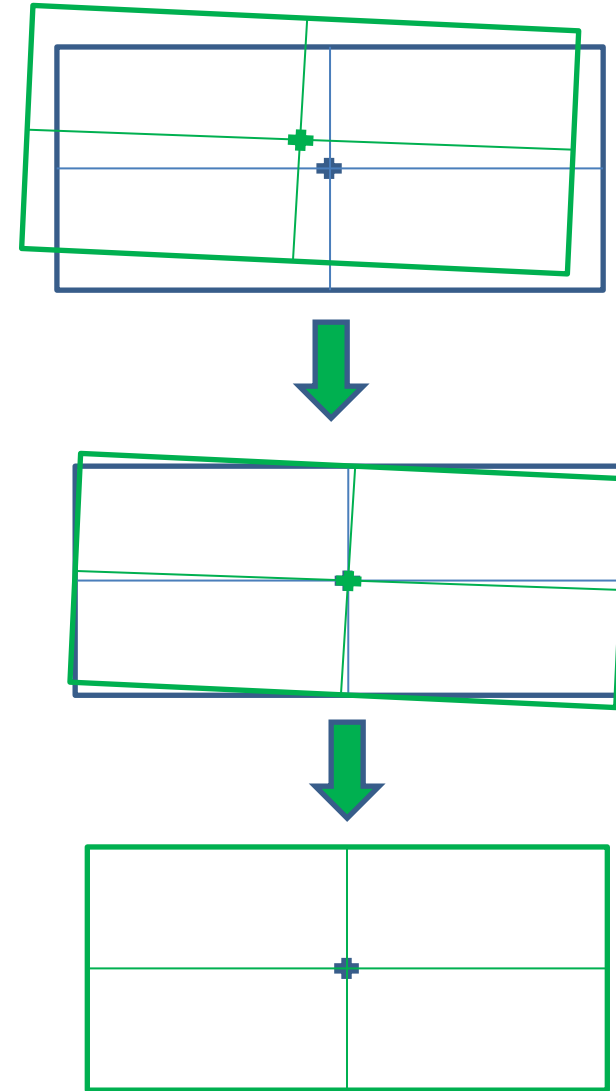
$$x = x' - y' \theta', \quad y = x' \theta' + y'$$

$$x' = (A_x^0 + dA_x)z + B_x,$$

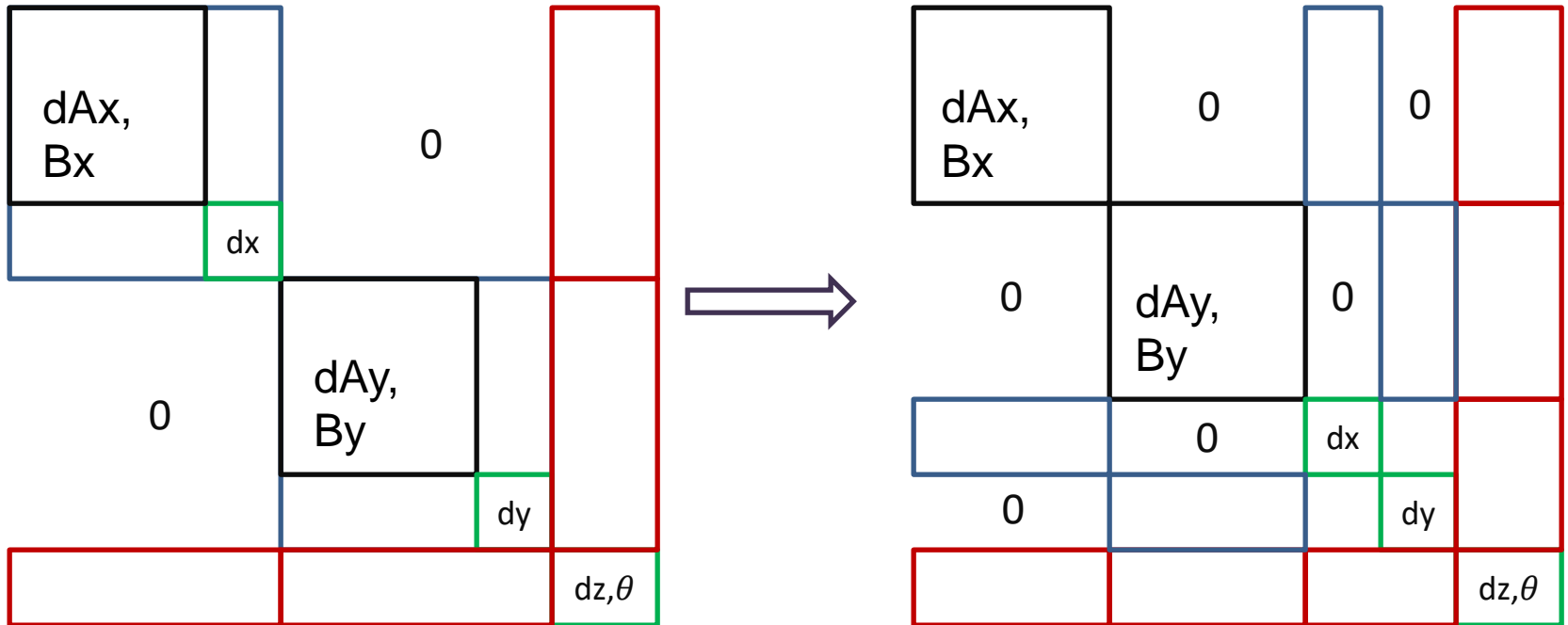
$$x' = A_x^0 z + dA_x z + B_x$$

$$y = (A_x^0 z + dA_x z + B_x) \theta' - y'$$

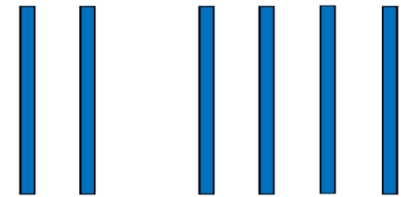
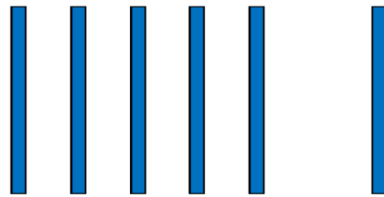
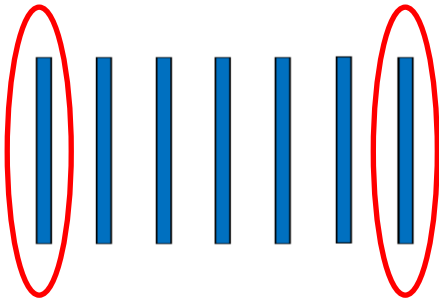
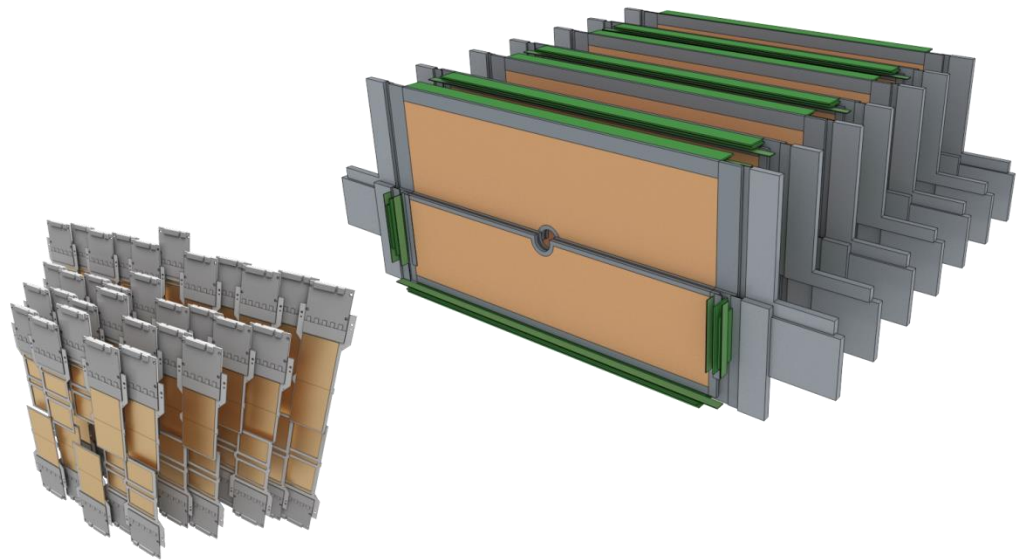
$$y = A_x^0 z \theta' + dA_x z \theta' + B_x \theta' - y'$$

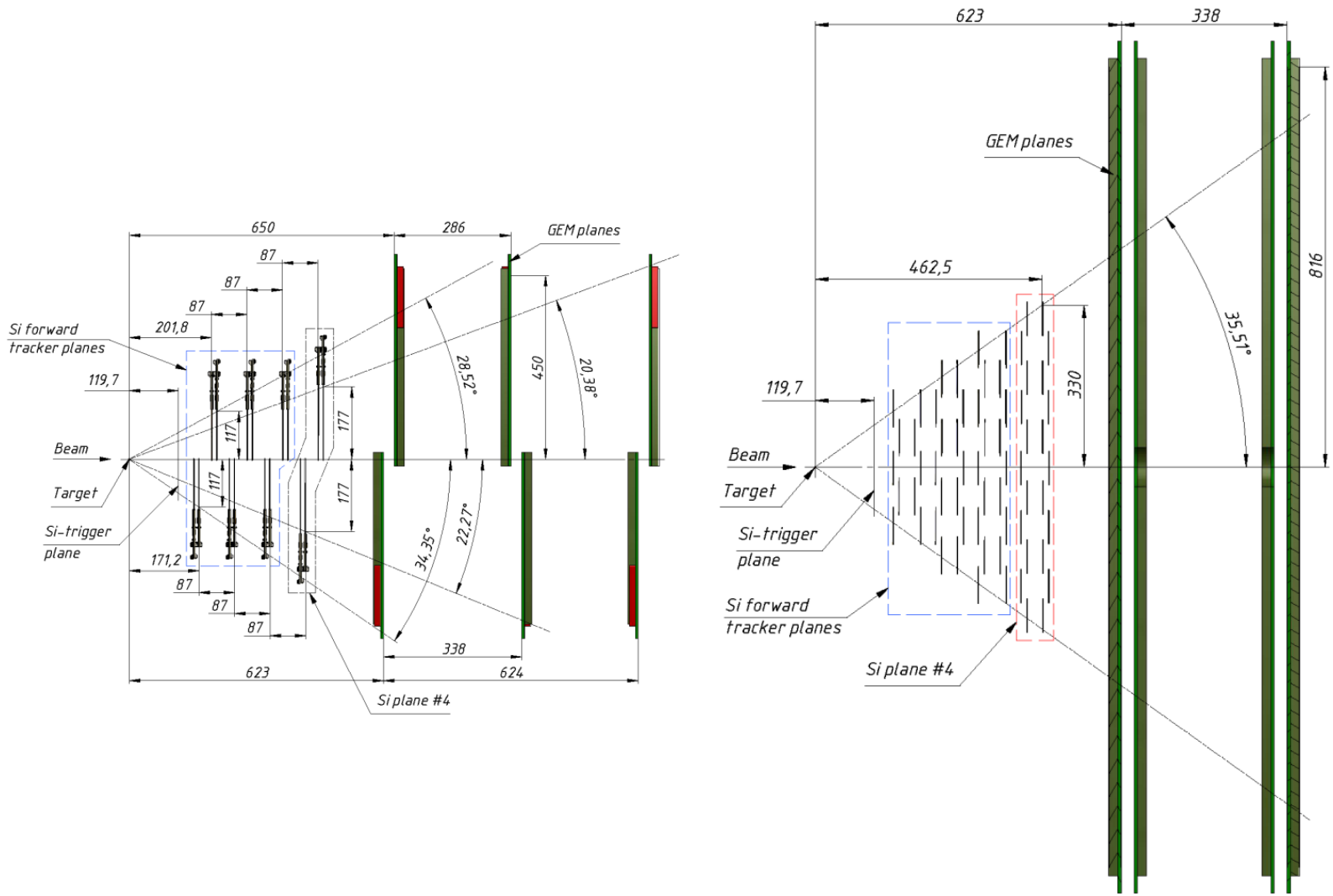


Alignment for x, y, z and θ



Period: 8
Number: 6764
Beam: $A = -1, Z = -1$
Beam energy: 3.8 GeV
Target: $A = -1, Z = -1$
Field voltage: 0.2655mV
N_events: 300000

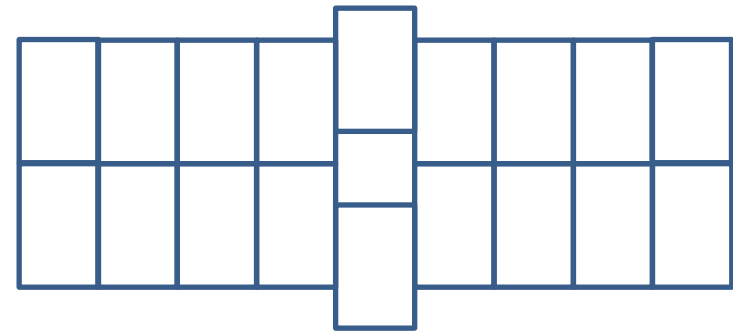
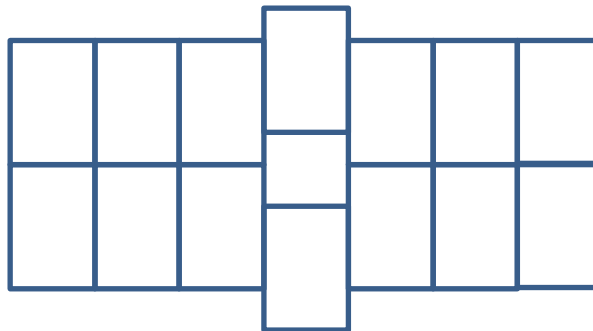
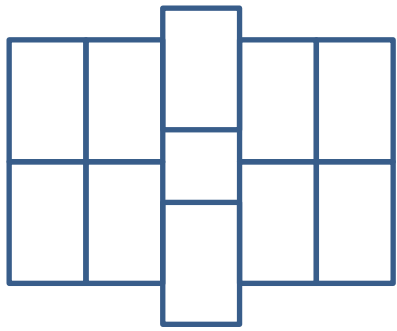
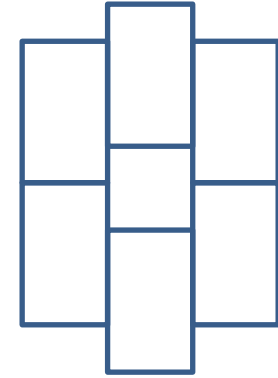
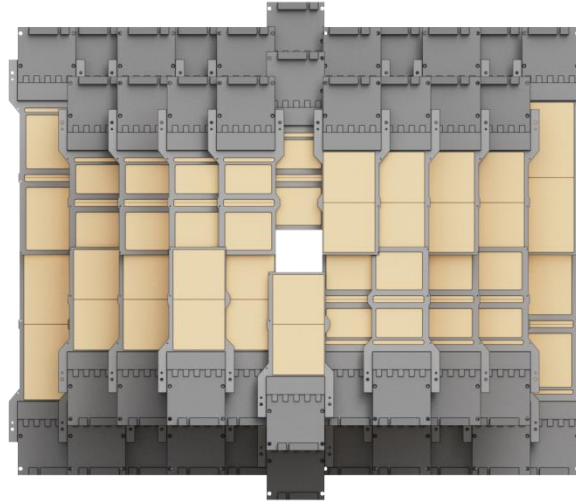




Schematic view of Forward Silicon detectors including 4th Si plane and first large aperture GEM stations in YZ (left) and XZ (right) projections.

Alignment for x, y and z

Period: 8
Number: 6764
Beam: A = -1, Z = -
1
Beam energy: 3.8 GeV
Target: A = -1, Z = -
1
Field voltage: 0.2655mV
N_events: ≈ 300000
N_hits_Si: ≈ 240000
N_tracks_Si: ≈ 32000



Principle of alignment

1. Volker Blobel, Claus Kleinwort. A New method for the high precision alignment of track detectors (<https://arxiv.org/abs/hep-ex/0208021>)
2. IMSL Fortran Library
(<https://www.imsl.com/products/imsl-fortran-libraries>)
3. Eigen
(https://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main_Page)
4. Millepede-II
(https://www.desy.de/~kleinwrt/MP2/doc/html/draftman_page.html)

Научная деятельность

- 1) Разработка программного решения для геометрической юстировки трековых детекторов STS и GEM эксперимента $BM@N$ мегапроекта NICA (сделаны 3 доклада на коллаборационном совещании эксперимента $BM@N$, сотрудничество ЛФВЭ Герценбергер К, Мерц С., начало сотрудничества 2022г.).
- 2) Математическое моделирование процессов взаимодействия тяжелых ионов и нанокластеров с конденсированными средами с применением молекулярной динамики и квантово-полевых методов (сотрудничество ЛЯР Мирзаев М., ЛНФ Попов Е., ЛТФ Донков А., ФМИ СУ Болгария, Христов И., Христова Р., МГУНиТ, Монголия, Батгэрэл Б., опубликовано 13 работ за последние 5 лет).
- 3) Разработка численных схем, параллельных алгоритмов и комплексов программ для малочастичных систем с использованием гибридных суперкомпьютеров. (сотрудничество ФМИ СУ Болгария, Христов И., Христова Р., опубликовано 6 работ за последние 5 лет).

Количество научных публикаций:

публикации в рецензируемых журналах 53, из них 19 за последние 5 лет.
статьи в научных сборниках и периодических изданиях 27
21 (из них 17 докладчик) докладов в конференциях и совещаниях за последние 5 лет

Научно-образовательная деятельность:

руководство над кандидатской диссертацией Тухлиева З.К. на тему «Моделирование структурных изменений в металлах при облучении тяжелыми ионами и нанокластерами на основе непрерывно-атомистического подхода»

Научно-организационная деятельность:

Участие в деятельности диссертационного совета ЛИТ

Участие в грантах:

Руководитель проекта РФФИ Россия-Монголия 20-51-44001 «Разработка континуально-атомистических моделей для исследования разномасштабных процессов в сложных системах физики» в 2021-2023г.
Соруководитель программы сотрудничество ОИЯИ-Болгария за 2018-2021г.

План работ

Отв. исп.: Шарипов З.А., Тухлиев З.К.

(Сотрудничество: ЛФВЭ Герценбергер К. В., Мерц С. П.)

Разработка программного комплекса для геометрической юстировки детекторов STS и GEM эксперимента BM@N.

Отв. исп.: Пузынина Т.П., Тухлиев З.К., Шарипов З.А.

(Сотрудничество: ЛЯР Мирзаев М.Н.; ЛНФ Попов Е.;, ЛТФ Донков А.; ФМИ-СУ, Болгария, Христов И.Г., Христова Р.Д.; МГУНиТ, Монголия, Б. Батгэрэл)

Моделирование процессов облучения различных мишеней ионами и нанокластерами на основе метода молекулярной динамики и непрерывно-атомистического подхода. Разработка алгоритмов и параллельных программ высокой точности для малочастичных систем.

**Список научных работ
за период с 2018 по 2023гг. (данные на 04.12.2023)**

Публикации в рецензируемых журналах (зарубежные):

1. Development of Continuum-Atomistic Approach for Modeling Metal Irradiation by Heavy Ions. Zarif Sharipov, Balt Batgerel, Stefka Dimova, et al., European Physical Journal Web of Conferences, Изд:EDP Science, 173, 03005, 2018
2. Modeling Thermal Effects in Metals Irradiated by Copper Nanoclusters. Balt Batgerel, Stefka Dimova, Temenujka Kупenova, et al., European Physical Journal Web of Conferences, Изд:EDP Science, 173, 06001, 2018
3. Combined Explicit-Implicit Taylor Series Methods. S.N Dimova, I.G. Hristov, R.D. Hristova, et al., CEUR Workshop Proceedings, Изд:CEUR Workshop Proceedings, 2267, 544-548, 2018
4. Molecular-Dynamic Modeling of Thermophysical Processes in Metals Irradiated by Nanoclusters. B. Batgerel, S.N Dimova, T.N. Kупenova, et al., AIP Conference Proceedings, Изд:American Institute of Physics, 2075, 110005, 2019
5. Molecular Dynamic Modeling of Long-Range Effect in Metals Exposed to Nanoclusters
B. Batgerel, I.V. Puzynin, T.P. Puzynina, et al., Springer Nature Switzerland AG 2019, ISSN:0302-9743, eISSN:1611-3349, Изд:Springer Nature Switzerland AG, LNCS 11189, 318-325, 2019
6. Parallelizing multiple precision Taylor series method for integrating the Lorenz system. P. Armyanov, S. Dimova, I. Hristov, et al., arXiv:2010.14993, 1-11, 2020
7. On the Efficient Parallel Computing of Long Term Reliable Trajectories for the Lorenz System. I. Hristov, R. Hristova, S. Dimova, et al. CEUR Workshop Proceedings, ISSN:1613-0073, Изд:CEUR Workshop Proceedings, 2933, 78-88, 2021
8. OPENMP COMPUTING OF A REFERENCE SOLUTION FOR COUPLED LORENZ SYSTEM ON [0,400]
I. G. Hristov, R. D. Hristova, S. N. Dimova, et al. CEUR Workshop Proceedings, ISSN:1613-0073, Изд:CEUR Workshop Proceedings, Vol-3041, 153-157, 2021
9. Effects of neutron irradiation at different fluencies on nanosized anatase titanium dioxide. Matlab N.Mirzayev, Lyubomir Slavov, Alexandar Donkov, et al., Radiation Physics and Chemistry, ISSN:0969-806X, eISSN:1879-0895, Изд:Elsevier Science Limited, 194, 109988, 2022

10. Structural study of W₂B obtained via mechanical alloying of W, B₄C, TiC and graphite before and after He ions irradiation. D. Neova, L. Slavov, A. A. Donkov, et al., Nuclear Materials and Energy, ISSN:2352-1791, Изд:Elsevier, 31, 101201, 2022
11. Numerical study of graphene protective properties for copper, iron, or tungsten substrates under different types of irradiation (proton, alpha particles, and particle clusters) A. A. Donkov, E. P. Popov, Z. A. Sharipov, et al. and P. Horodek, AIP Conference Proceedings, 2551, 030001-1–030001-6, 2022
12. New Families of Periodic Orbits for the Planar Three-Body Problem Computed with High Precision. I. Hristov, R. Hristova, I. Puzynin, et al., CEUR Workshop Proceedings, ISSN:1613-0073, Изд:CEUR Workshop Proceedings, Vol-3191, 45-50, 2022
13. Parallelizing Multiple Precision Taylor Series Method for Integrating the Lorenz System. Ivan Hristov, Radoslava Hristova, Stefka Dimova, Petar Armyanov, et al. Springer, Cham. Advanced Computing in Industrial Mathematics. BGSIAM 2020. Studies in Computational Intelligence, vol 1076, 2023
14. Effects of helium ion irradiation on tungsten-based composites: neutron diffraction; as a real-time diffractometer. D. Neov, A. I. Beskrovnyi, A. S. Abiyev, et al. Advanced Physical Research, ISSN:2663-8436, 5, 2, 95-102, 2023
15. A Database of High Precision Trivial Choreographies for the Planar Three-Body Problem. Hristov, I., Hristova, R., Puzynin, I., et al. Lecture Notes in Computer Science, ISSN:0302-9743, Изд:Springer, 13858, 171-180, 2023

Публикации в рецензируемых журналах (русские):

1. Развитие непрерывно-атомистического подхода для моделирования процессов взаимодействия тяжелых ионов высоких энергий с металлами. Батгэрэл Б., Пузынин И. В., Пузынина Т. П., и др. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, ISSN:0207-3528, Изд:Академиздатцентр, 7, 103-107, 2018
2. Молекулярно-динамическое моделирование эффекта дальнего действия в металлах при облучении нанокластерами меди (Cu¹⁴¹). З.А. Шарипов, Б. Батгэрэл, И.В. Пузынин, и др. Р.Д. Христова, Известия РАН. Серия физическая, ISSN:0367-6765, Изд:МАИК, 83, 10, 1306-1310, 2019
3. Molecular-Dynamics Simulation of the Interaction Processes of Pulsed Ion Beams with Metals. I. V. Puzynin, T. P. Puzynina, I. G. Hristov, et al. Поверхность рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 14, 6, 1342–1345, 2020
4. Моделирование процессов взаимодействия нанокластеров меди с металлическими мишенями со структурой реальных кристаллов с дефектами типа пор. З.А. Шарипов, Б. Батгэрэл, И.В. Пузынин, и др. Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, ISSN:0207-3528, Изд:Академиздатцентр, 8, 19-24, 2022