

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КАТАЛИЗА И ПРОТОННОГО ТРАНСПОРТА В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ТОПЛИВНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

В.М. Волохов¹, Д.А. Варламов^{1,2}, Т.С. Зюбина¹, А.С. Зюбин¹, А.В. Волохов¹, Г.А. Покатович¹

¹ *Институт проблем химической физики РАН, г.Черноголовка*

² *Институт экспериментальной минералогии РАН, г.Черноголовка*

Одной из актуальных задач развития цивилизации является поиски новых экологически чистых источников энергии для обеспечения нужд промышленности, транспорта, коммуникаций. С этой точки зрения весьма подходящими становятся низкотемпературные электрохимические топливные элементы (ЭТЭ), предназначенные для эффективного (с КПД до 75-80%) «прямого» превращения химической энергии реакций окисления различных топливных сред (водорода, низших углеводородов, спиртов, органических кислот) в электроэнергию без использования высокотемпературных процессов горения. Использование ЭТЭ позволяет в перспективе во многом решить две энергетические проблемы цивилизации:

(а) создать новые экологически чистые источники энергии различного масштаба: от автономных электростанций и двигателей авиа- и автотранспорта до компактных долговременных многоразовых источников тока для мобильных устройств (ноутбуков, телефонов, измерительных приборов и т.п.);

(б) снизить скорость ухудшения экологической ситуации в связи с развитием классической электроэнергетики, включая различные типы загрязнения: выбросы двигателей внутреннего сгорания, продукты сжигания органического топлива на ТЭС, радиоактивные отходы АЭС, отходы гальванических источников тока.

Основным принципом ЭТЭ является «прямое» (без участия горения) преобразование химической энергии электрохимической реакции окисления топлива в воду ($\pm\text{CO}_2$), электричество и тепло. Топливом являются обычно водород, низшие углеводороды (метан, пропан и т.д.) и жидкие топлива на основе низкомолекулярных спиртов (метанол, этанол и т.п.). Привлекательность последних обусловлена их химической активностью и высокой удельной энергией на единицу массы и объема, а также тем, что они относятся к легко возобновляемым источникам энергии (с/х производство) с низкой себестоимостью. Отметим, что жидкие топлива существенно более удобны для хранения и транспортировки, нежели водород или углеводороды, но менее энергоэффективны. Носителями же заряда во всех случаях являются протоны.

Упрощенно модель ЭТЭ может быть описана следующим образом: водородно-(спиртово)-кислородный топливный элемент содержит протонопроводящую полимерную композитную мембрану, которая разделяет два электрода – анод и катод, где каждый электрод обычно представляет собой пластину (матрицу) с высокой удельной поверхностью из углерода или оксидов металлов с нанесенным нанокатализатором на основе платины или сплава платиноидов (рис.1). На катализаторе анода молекулярный водород или спирты диссоциируют и теряют электроны. Возникающие протоны транспортируются через мембрану к катоду, а электроны отдаются во внешнюю цепь. На катализаторе катода молекула кислорода диссоциирует и соединяется с пришедшими протонами и образует воду, которая является единственным продуктом реакции (в виде пара и/или жидкости) плюс выделяется тепло. Реальные же электрохимические процессы (особенно для углеродсодержащих топлив), конечно, существенно сложнее и с трудом поддаются стандартным средствам моделирования.

Электрохимический топливный элемент

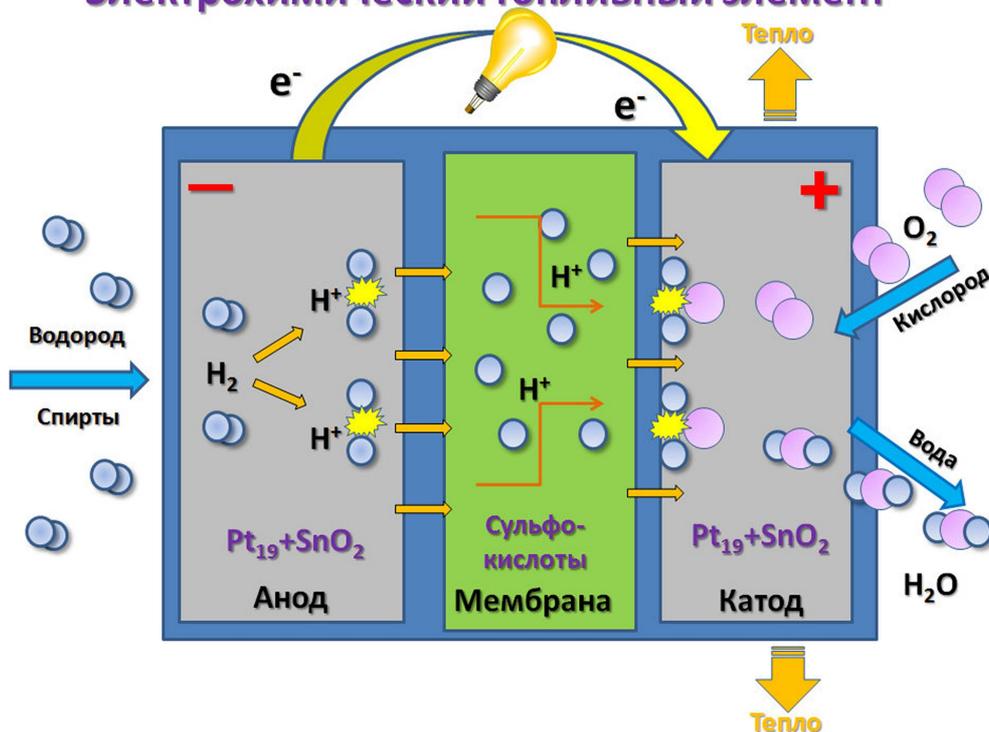


Рис. 1. Схема низкотемпературного электрохимического топливного элемента с наноструктурированными каталитическими электродами и твердой полимерной мембраной.

Экспериментальное (аналоговое) моделирование влияния различных факторов на свойства композитных систем – компонентов ЭТЭ и процессов, проходящих в них, ставит трудоемкие и затратные задачи, которые либо фрагментарно решаются в лабораторных экспериментах (с косвенным получением информации о механизмах и структурах), либо вообще не имеют аналитического описания. Поэтому в отсутствие корректных лабораторных экспериментов существенную помощь в определении характеристик процессов и оценки влияния отдельных факторов на свойства изучаемой системы способны оказать современные численные методы квантово-химического и молекулярно-динамического моделирования с высокой степенью детализации. Эти методы позволяют получить новые теоретические данные о строении и свойствах наноструктурированных катализаторов и протонпроводящих материалов и впоследствии разрабатывать новые высокоэффективные материалы для различных электрохимических устройств. Детальное моделирование на микроуровне элементарных процессов и механизмов электрокатализа и транспортных процессов в полимерных ЭТЭ ведет к улучшению контроля над химическими реакциями внутри последних и делает возможным конструирование наиболее оптимальных катализаторов с точки зрения эффективности процессов, ценообразования и экологичности. Это один из путей к удешевлению производства полимерных ЭТЭ за счет уменьшения стоимости катализаторов, преодоления энергетических потерь, увеличения времени жизни электродов и мембран, повышение экологичности производства, эксплуатации и утилизации ЭТЭ.

Ранее подобное моделирование ограничивалось катастрофической недостаточностью вычислительных ресурсов, поскольку даже в упрощенном виде время расчета поведения небольших атомных кластеров определялось месяцами, а моделирование систем в целом оценивается ориентировочно до $n \cdot 10^6$ процессорочасов в год. Поэтому только в последнее время подобное моделирование стало целесообразным с использованием суперкомпьютерных установок (тера- и петафлопсной мощности), проблемно-ориентированных «гибридных» установок и грид-полигонов на основе высокопроизводительных ресурсов.

Наиболее активными в окислении водорода и небольших органических молекул являются катализаторы на основе высокодисперсных кластеров платины (наночастиц). Для стабилизации катализаторов в нанокристаллическом состоянии используют носители с высокой удельной площадью поверхности и высокой электронной проводимостью, например, материалы на основе углерода. Однако они недостаточно стабильны в окислительных условиях и легко корродируют в присутствии платины. Ранее установлено, что композитные системы на основе нанокластеров платины и полупроводниковых оксидов, таких как диоксиды олова и титана, являются весьма перспективными катализаторами для низкотемпературных топливных элементов. К их преимуществам относится то, что они не окисляются в процессе работы и более устойчивы к отравлению монооксидом углерода по сравнению с катализаторами на углеродных носителях, что является принципиальным преимуществом для создания топливных элементов на водороде и спиртах. В роли

протонопроводящих мембран ЭТЭ в последнее время очень активно используются гетерополикислоты как органического, так и неорганического происхождения на основе серы, фосфора и т.п.

Основные механизмы процессов, происходящих в ЭТЭ на основе диоксидов металлов (Sn, Ti) и органических сульфокислот были смоделированы методами квантово-химического компьютерного моделирования на ВЦ ИПХФ РАН, а затем на суперкомпьютерных установках НИВЦ МГУ «Ломоносов» и «Чебышёв» с применением прикладного программного пакета (ППП) VASP (Vienna Ab initio Simulation Package, <https://www.vasp.at>).

ППП VASP предназначен для моделирования различных процессов в объеме и на поверхности твердых тел (прежде всего катализа и ионной проводимости) в рамках неэмпирических подходов, основанных на применении функционалов плотности с использованием периодических граничных условий с базами на плоских волнах. ППП VASP позволяет проводить оптимизацию структуры и выполнять моделирование в рамках молекулярной динамики. Метод основан на приближении локальной плотности (при конечных температурах), при этом свободная энергия считается вариационным параметром, и на каждом шаге выполняется точная оценка мгновенного электронного основного состояния. В программе VASP используется эффективная схема диагонализации матриц и эффективная схема смешивания электронной плотности *Pulay/Broyden*, а также значительно улучшены процедуры сходимости процессов ССП и оптимизации, что существенно повышает эффективность расчетов. Пакет обеспечивает хорошую точность описания структурных и энергетических характеристик систем, включающих до нескольких сотен атомов. Наиболее удачными для моделирования больших систем (подобных компонентам ЭТЭ) в ППП VASP является метод функционала плотности (DFT) с учетом градиентной коррекции (GGA) и периодических граничных условий с базисом проектированных плоских волн PAW с соответствующим псевдопотенциалом. Для моделирования строения и свойств металлических частиц наиболее удачными являются функционалы, настроенные на передачу поведения обменно-корреляционного потенциала электронного газа. Одним из таких функционалов является PBE, который для диэлектриков и полупроводников работает примерно с той же точностью, что и B3LYP, а для металлов дает существенно меньшие погрешности. При моделировании был использован базис «hard» проектированных присоединенных волн (projector-augmented wave, PAW), в котором используются псевдопотенциалы с включением проекционных операторов на остовные состояния, что имитирует ортогональность валентных состояний к остовным. Этот подход эквивалентен по точности расчетам с использованием линейризованных присоединенных плоских волн с полноэлектронным потенциалом (full-potential linearized augmented-planewave (FLAPW) method). Причины, по которым был выбран функционал PBE, а не B3LYP, следующие: по сравнению с экспериментом погрешности в расчете энергии атомизации полупроводников и диэлектриков для них совпадают, однако для металлов с использованием PBE отклонения от эксперимента не превышают 5-15%, а для B3LYP могут достигать 45%.

Предел по энергии (E_c), определяющий полноту базисного набора, был выбран равным 400 эВ. Волновая функция представлялась в виде смеси компонент разной мультиплетности, вклады которых определялись по минимуму полной энергии. Такой подход обеспечивает точность расчета равновесных расстояний – 0.01-0.02 Å, относительные энергии – 0.05-0.10 эВ, сдвиги спектров РФС – 0.1-0.3 эВ. В таком приближении для рассматриваемых систем параметры кристаллов и равновесные расстояния могут быть получены с точностью 1–3% по отношению к экспериментальным значениям. Исключение составляют водородные связи, которые как в расчетах, так и в аналоговом эксперименте имеют достаточно большой разброс значений, из-за чего относительная ошибка в описании структур возрастает до 4-12%.

Сначала было смоделировано взаимодействие кластеров платины разной размерности (Pt_6 - Pt_7) с поверхностями диоксидов металлов (олова и титана). Комплекс VASP позволяет проведение расчетов кристаллических структур с учетом трансляционной симметрии, поэтому для моделирования процессов на поверхности использовались толстые «пласты» носителя (4–8-слойная повторяющаяся ячейка из 100–300 атомов $(SnO_2)_{48}$ – $(SnO_2)_{96}$). Расстояния между пластинами были выбраны так, чтобы взаимодействие между находящимися в соседних пластах частицами являлось слабым и не оказывало заметного влияния на результат. В расчетах производилась полная оптимизация координат всех атомов. Поверхность «границ» $\langle 110 \rangle$ кристалла SnO_2 моделировалась «пластами», состоящими из 4 слоев, каждый слой строился из размноженных в плоскости 16 структурных единиц SnO_2 , пласты расположены с шагом 24 Å. Такой расчет обеспечивает расстояние между верхним слоем кластера платины и нижним слоем носителя ~ 10 Å, что приводит к отсутствию заметного взаимодействия между слоями и позволяет расположить на поверхности кластер платины. В качестве элемента, периодически размноженного в двух направлениях, был взят 192-атомный кластер $(SnO_2)_{64}$ (4 слоя по 48 атомов в слое). В процессе работы проводилась полная оптимизация геометрических параметров. При анализе результатов моделирования было установлено, что для наиболее стабильных типов поверхности диоксида олова переход от стехиометрической формы к восстановленной приводит к значительному (до 50%) увеличению энергии взаимодействия кластера металла с поверхностью. Из результатов моделирования следует, что осаждение наночастиц платины на восстановленные поверхности диоксида олова с последующим их окислением до стехиометрического состава способно увеличить стабильность и эффективность композитной каталитической системы Pt- SnO_2 .

Сравнение рассчитанных в процессе моделирования и экспериментальных значений показали совпадения: для равновесных расстояний и параметров решетки диоксида олова и платины - в пределах 0.6-1.4%; теплота сублимации - до 6.6%; энергия адсорбции водорода и кислорода – до 13%; параметр «а» элементарной ячейки - 4.77 и 4.74 Å соответственно.

Теперь рассмотрим результаты квантово-химического моделирования процессов диссоциации водорода и его взаимодействия с катализатором анода. В работах авторов [1,2] описаны результаты моделирования взаимодействия молекулярных водорода с поверхностями кристаллов и кластеров платины разного размера как изолированных, так и нанесенных на поверхность SnO₂. На основе расчетов было показано, что молекула водорода присоединяется к поверхностям кристалла и изолированным частицам платины, строение которых аналогично структуре фрагментов кристалла, без барьера с выделением энергии ~1.0-1.7 эВ, при этом происходит диссоциация молекулы H₂. Вслед за диссоциацией начинается миграция образованного протона по поверхности платины по направлению к носителю с барьерами 0.1-0.2 эВ. Сползание атомарного водорода с кластера платины («спилловер»-эффект) освобождает место для следующих актов адсорбции молекулярного водорода и его диссоциации. Таким образом, становится возможным многоактное использование кластеров платины для формирования обособленных атомов водорода.

При использовании моделей малых кластеров Pt, отличающихся по строению от фрагментов кристаллической решетки металлической платины, подобное взаимодействие не всегда приводит к диссоциации H₂. Для моделирования процессов с участием больших кристаллоподобных наноструктур платины был взят кластер Pt₂₉ со структурой близкой к кристаллической. Моделирование показало, что строение комплексов платины с водородом меняется при изменении размера кластеров. Для малых кластеров (типа Pt₆) наиболее выгодно присоединение атомов H к вершинам, для средних (типа Pt₁₉) – к ребрам, с формированием одинарных связей Pt-H), для крупных (типа Pt₅₅ и Pt₇₉) – к граням с формированием мостиков Pt-H-Pt, что характерно для поверхностей кристалла платины. Атомы водорода могут мигрировать по поверхности изолированного кластера платины с барьерами ~0.2–0.4 эВ. Поскольку кинетическая энергия захваченных атомов заметно выше величин барьеров на пути их миграции, следует ожидать, что атомы водорода не останутся вблизи соответствующего центра, а будут распределяться по поверхности наночастицы.

Компьютерное моделирование процессов адсорбции, диссоциации и миграции водорода в системе водород — платина — диоксиды металлов показало, что не происходит принципиальных изменений в характере взаимодействия водород – платина при переходе от свободной наночастицы платины к нанесенной на поверхность диоксида олова. Однако миграция атомов водорода по поверхности наночастицы платины приводит к понижению барьеров и энергии системы по мере приближения протона к поверхности носителя SnO₂, что существенно повышает эффективность каталитического процесса.

На аноде безбарьерная адсорбция (и диссоциация) молекулярного водорода на поверхность кластера платины, нанесенного на поверхность SnO₂, приводит к переходу атомарного водорода на поверхность носителя – диоксида олова (рис.2). Энергия адсорбции H₂ на ребро верхней поверхности кластера Pt₁₉ равна 1.6 эВ. С малыми барьерами (0.1-0.2 эВ) атомы водорода мигрируют к носителю по ребру боковой поверхности кластера платины, освобождая место для следующего акта диссоциации. Энергия, которая выделяется при перемещении атомов водорода с верхней поверхности кластера Pt₁₉ на поверхность SnO₂, равна 1.4 эВ.

Было установлено, что атомам водорода энергетически выгоднее (на 1.6 эВ) находиться вблизи кластера Pt на носителе, чем на самом кристалле платины. В результате движения атома водорода по боковой поверхности кластера платины образуется изомер, в котором атомы водорода находятся на поверхности носителя SnO₂. Таким образом, водород «уходит» с поверхности нанокластера и освобождает место для следующего акта диссоциации молекулярного водорода.

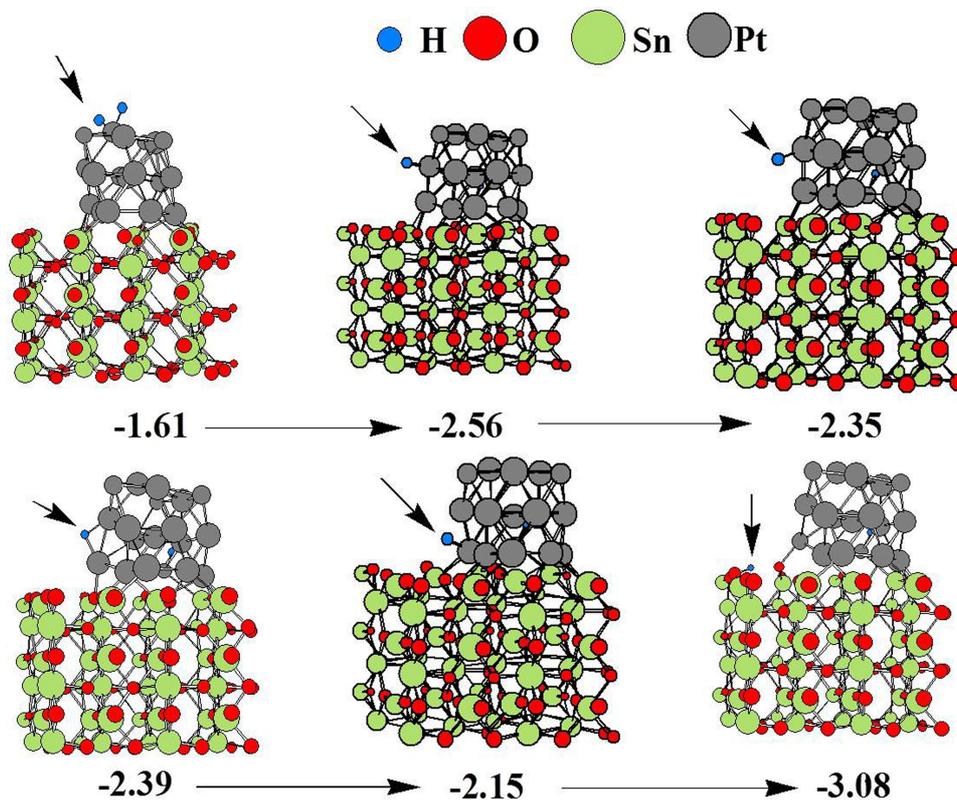


Рис. 2. Модель динамики движения водорода по кластеру платины Pt19 на поверхность диоксида олова (SnO₂)₆₄

Далее, было проведено моделирование переноса полученного протона через мембрану. Детальное понимание механизмов транспорта протонов (ионов) через полимерные материалы является весьма важной задачей, не вполне решенной на данный момент. Картина осложняется многокомпонентностью транспортных полимерных систем, их сложной морфологией и отсутствием «дальнего» порядка или кристалличности («soft matter»). Это приводит к крайне многопараметрической задаче, которая лишь фрагментарно решается в лабораторных экспериментах (с косвенным получением информации о механизмах транспорта) и процесс пока не имеет четкого аналитического описания. Однако, методами компьютерного моделирования можно с необходимой точностью осветить все детали транспорта протонов. Сопряжение пространственных и временных масштабов в компьютерной модели позволяет проанализировать детали протонного и ионного транспорта, начиная от квантового уровня и вплоть до среднеполевого («mean-field») представления.

Для переноса протона энергетически наиболее выгодный способ – это его «эстафетный» механизм движения носителя по протонопроводящим каналам на поверхности и в объеме мембраны [3]. При наличии канала проводимости протон с поверхности SnO₂ переходит к ближайшей молекуле воды, которая отдает свой протон соседней молекуле воды и, по цепочке, последняя молекула воды, приобретая протон у предпоследней молекулы воды, отдает свой протон кислороду на кластере платины для образования OH⁻ фрагмента. Рассчитанная реакция «эстафетной» миграции протона с образованием молекулы воды экзотермична на 0.3 эВ на первом шаге (образование OH⁻), эндотермична на 0.3 эВ на втором шаге (образование H₂O). Этот процесс проходит с барьерами ≤0.5 эВ (при расстояниях O-O=2.5-2.9Å), зависящими от расстояний между атомами кислорода молекул воды, образующих протонопроводящие каналы.

Таким образом, можно сказать, что на аноде адсорбция водорода на поверхность кластера платины, нанесенной на поверхность SnO₂, приводит к переходу атомарного водорода на поверхность носителя, откуда он посредством мембраны по эстафетному механизму через протонопроводящие мостики из молекул воды переводится на катод на поверхность кластера платины и образует с адсорбированной на нем молекулой кислорода молекулу воды. Описанный процесс экзотермичен на 4.64 эВ и проходит с барьерами, определяемыми возможностями мембраны образовывать протон проводящие каналы. В случае, если мембрана обеспечивает расстояния между протонопроводящими атомами кислорода, близкие к 2.5-2.9 Å, барьеры проводимости по эстафетному механизму составляют 0.1-0.5 эВ. Пример расчета структуры мембраны на основе гидрата гетерополикислоты H₃PW₁₂O₄₀ · 15H₂O и смоделированный путь перемещения протона через нее приведены на рис.3.

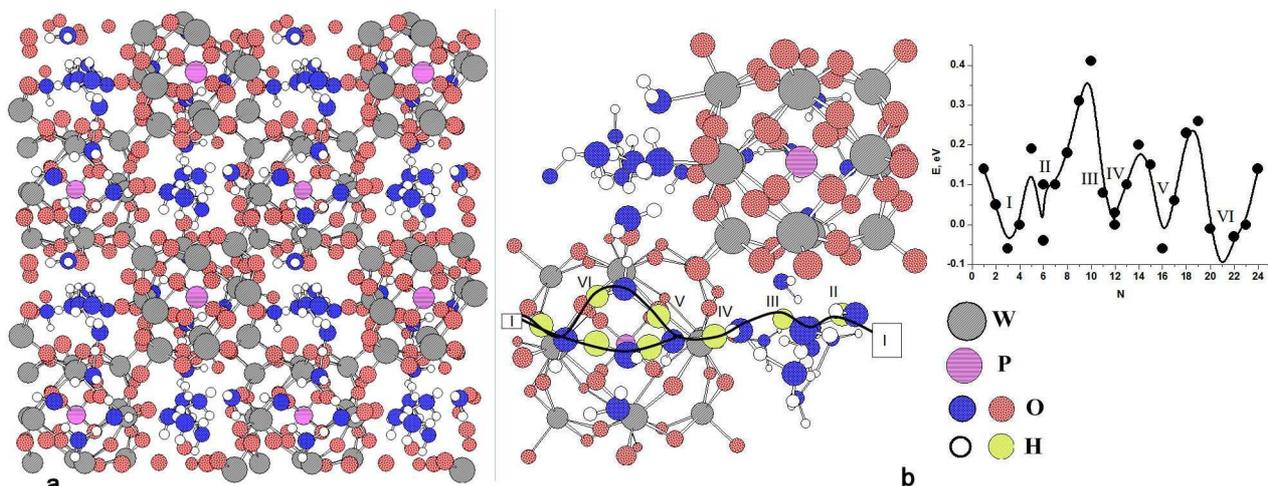


Рис. 3. а - Структура кристалла $H_3PW_{12}O_{40} \cdot 15H_2O$, б - схема миграции протона в объеме мембраны и изменение относительной энергии (в эВ). Синими кружками отмечены атомы кислорода, входящие в состав кристаллизационной воды, зелеными – возможные положения атома водорода при миграции. Цифрами и толстой черной линией отмечена траектория движения и минимально-энергетический путь иона H_3O^+ в процессе миграции в объеме.

В зоне катода происходит окисление «пришедшего» водорода на композитном (Pt+SnO₂) катализаторе. Основные характеристики данного процесса также смоделированы с применением ППП VASP на СК «Ломоносов». На катоде молекула кислорода безбарьерно адсорбируется на ребро боковой поверхности кластера Pt₁₉, образуя различные изомеры перекисного типа с энергией 1.2-1.7 эВ. Диссоциация молекулы кислорода на поверхности комплексного катализатора Pt₁₉/SnO₂ – энергетически выгодный (на 0.10 эВ) процесс, проходящий с барьером 0.49 эВ. Эта диссоциация отвечает переходу от пероксидного (р) изомера к изомеру (m) с однокоординированными атомами кислорода. Барьер диссоциации молекулы кислорода на ребре кластера Pt₁₉/SnO₂ снижается при приближении к поверхности носителя SnO₂ (001): барьер равен 0.5 эВ на уровне 2 и 3 слоев атомов платины от поверхности носителя и 0.3 эВ на уровне 1 и 2 слоя атомов платины. Барьер перехода от изомера с однокоординированным (m) атомом кислорода к изомеру с двухкоординированным (b) атомом кислорода находится в интервале 0.1-0.5 эВ и тем меньше его величина, чем ближе атом кислорода к поверхности SnO₂ [4].

Образование OH- фрагмента на поверхности диоксида олова из молекулы O₂ с участием кластера Pt₁₉/SnO₂/H₂ – энергетически выгодный процесс с выделением энергии 3.29 эВ. Однако атому кислорода энергетически выгоднее оставаться связанным с атомом платины вплоть до образования воды или OH-фрагмента. Отметим, что образование в результате эстафетного механизма связи Pt-H намного (1.4 эВ) менее выгодно, чем образование связи OH-, поэтому все приходящие протоны будут взаимодействовать на поверхности кластера с кислородом, а не с платиной. Аналогичный процесс эстафетного переноса (но с большим барьером активации) можно наблюдать и для пероксидного изомера. Основное отличие наблюдается в области, где в присутствии H_{3O}⁺ (с дополнительным барьером 0.24 эВ) происходит разрыв перекисной структуры O-O и образование OH- фрагмента и однокоординированного атома кислорода.

Ввиду эндотермичности на последнем шаге реакции образовавшуюся молекулу воды следует отводить от кластера. В противном случае возможно заикливание процесса на катодном кластере платины: распад воды на два OH-фрагмента при взаимодействии с атомарным кислородом и обратный процесс образования молекулы воды из двух рядом стоящих OH-фрагментов с малыми энергетическими затратами (0.2-0.3 эВ). В целом, процесс присоединения молекулы кислорода к кластеру Pt₁₉/SnO₂/H₂ и отрыв образовавшейся в результате взаимодействия одной молекулы воды (Pt₁₉/SnO₂/H₂ + O₂ → Pt₁₉/SnO₂/O + H₂O) энергетически выгоден на 1.6 эВ.

Таким образом, методом квантово-химического моделирования с использованием ППП VASP проведены расчеты каталитических анодных и катодных процессов, происходящих на поверхности катализатора Pt₁₉, нанесенного на оксидные носители SnO₂ и TiO₂, и процессов адсорбции воды и транспорта протонов по поверхности и в объеме мембраны на основе органических сульфо- и гетерополикислот.

Эффективность использования вычислительных ресурсов в процессе квантово-химического моделирования изученных каталитических структур была приведена ранее [5] и детальнее будет описана на конференции. Вкратце отметим: эффективное ускорение ППП VASP для данного типа задач наблюдалось при использовании до 32 CPU с последующей фиксацией, и, вероятно, лимитируется скоростью обмена данными между узлами из-за значительного роста объема пересылаемых данных. При увеличении количества требуемых CPU свыше 48 общее время расчетов даже увеличивается из-за зависимости от скорости постановки задачи в очереди и обмена. Среднее эффективное время расчета 1-шагового перемещения протона на кластере Pt₂₉ для 32 ядер составляло около 5,5 часов при потребности увеличения числа шагов от 30 до 300. Следует отметить, что, к сожалению, на момент написания данной статьи в ППП VASP поддержка «гибридных» моделей вычислений

осуществляется только на уровне бета-тестирования и не входит в распространяемый вариант пакета, поэтому использование GPU-акселераторов пока неэффективно.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного центра НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова [6] и ВЦ ИПХФ РАН при финансовой поддержке Президиума РАН по Программам фундаментальных исследований №24 «Фундаментальные основы технологий наноструктур и наноматериалов» и №14 «Проблемы создания информационно-вычислительной среды на основе GRID-технологий, облачных вычислений и современных телекоммуникационных систем».

ЛИТЕРАТУРА:

1. Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов, А.В. Арсатов, З.Г. Бажанова «Диссоциативная адсорбция молекулярного водорода на кластерах платины Pt6 и Pt19, расположенных на поверхности диоксида олова. Квантово-химическое моделирование» // Журн. неорг. химии, 2011, 56, № 10, с.1658-1668
2. Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов, З.Г. Бажанова «Квантово-химическое моделирование «спилловер»-эффекта водорода в системе H/Pt/SnO₂» // Журн. неорг. химии, 2011, 56, № 11, с.1848-1857
3. A.Z. Weber, J. Newman «Modeling Transport in Polymer-Electrolyte Fuel Cells» // Chem. Rev., 2004, 104, 4679-4726
4. Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, Ю.А. Добровольский, В.М. Волохов «Взаимодействие молекулярного кислорода с кластером Pt19/SnO₂/H₂. DFT-расчет» // Журн. неорг. химии, 2013, том 58, № 3, с. 360–369
5. В.М. Волохов, Д.А. Варламов, Т.С. Зюбина, А.С. Зюбин, А.В. Волохов, Г.А. Покатович Мат-лы международной научной конференции "Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2014)", Ростов-на-Дону, 1-3 апреля 2014 г., Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, с.235-242
6. Вл.В. Воеводин, С.А. Жуматий, С.И. Соболев, А.С. Антонов, П.А. Брызгалов, Д.А. Никитенко, К.С. Стефанов, Вад.В. Воеводин. «Практика суперкомпьютера "Ломоносов"» // Открытые системы, 2012, 7, с.36-39