

На правах рукописи
УДК 539.42+538.91+538.93

Жиляев Петр Александрович

**Атомистическое моделирование воздействия
импульсных энерговкладов на конденсированную фазу:
нагрев электронов и откольное разрушение**

Специальность 01.04.07 - Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2015

Работа выполнена в Государственном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» на кафедре физики высокотемпературных процессов (Базовый институт Учреждение Российской академии наук Объединенный институт высоких температур РАН)

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, зав. отд.
доцент Стегайлов Владимир Владимирович
(Объединенный институт высоких температур РАН, Москва)

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, вед. науч. сотр.
профессор Фальковский Леонид Александрович
(Институт теоретической физики
им. Л.Д. Ландау РАН, Черноголовка)

кандидат физико-математических наук, ст. науч. сотр.
Фомин Юрий Дмитриевич
(Институт физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк)

Ведущая организация: Национальный исследовательский
технологический университет
«Московский институт стали и сплавов», Москва

Защита состоится 26 октября 2015 г. в 12:00 часов на заседании диссертационного совета Д. 002.023.03 при ФИАН по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

Отзывы направлять по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФИАН и на сайте www.lebedev.ru

Автореферат разослан 25 июня 2015 г.

Ученый секретарь диссертационного совета Д. 002.023.03 при ФИАН
доктор физ.-мат. наук Казарян Мишик Айразатович

1 Общая характеристика работы

Проведено компьютерное исследование и теоретический анализ отклика конденсированной фазы на ударно-волновое и импульсное лазерное воздействия. Методом классической молекулярной динамики изучены процессы пластической деформации и разрушения. В рамках теории функционала плотности предложена и апробирована методика расчета давления и коэффициента теплопроводности разогретого плотного вещества (РПВ).

Актуальность работы обусловлена необходимостью разработки новых теоретических моделей, описывающих воздействия импульсов высоких энергий на конденсированную фазу. Современные экспериментальные методы (ударно-волновые эксперименты, воздействия лазерных импульсов на вещество, электровзрыв проволочек) позволяют вносить мощный импульсный энерговклад в вещество за малый промежуток времени. Такое воздействие играет огромную роль в прикладных технологиях: обработка поверхности на наномасштабах, лазерное напыление, высокоскоростная обработка и формовка материалов, создание ударостойких материалов, пробивание защитных оболочек, ударное повреждение космических аппаратов и т. д.

Механический отклик некоторых типов материалов при высокоскоростном деформировании может существенным образом отличаться от случая статических нагрузок. Для целого ряда металлов наблюдается пороговая скорость деформации, после которой начинается резкий рост зависимости напряжения течения от скорости деформирования [1]. Подобное поведение характерно и для прочностных свойств. Высокие скорости деформации достигаются не только в ударно-волновых экспериментах, но и в экспериментах по воздействию ультракороткого лазерного импульса на вещество [2,3]. Поэтому отклик плотных сред на импульсное воздействие требуют разработки теоретических моделей.

Цели работы

1. Исследование механизмов разрушения на примере монокристалла алюминия при высокоскоростном нагружении и определение зависимости его откольной прочности от скорости деформирования.
2. Развитие метода разделения полного электронного давления на локализованную и делокализованную составляющие и определение этих составляющих для алюминия и золота.
3. Разработка методики расчета коэффициента теплопроводности в двухтемпературном разогретом плотном веществе.
4. Исследование зависимости коэффициента теплопроводности от температуры электронов для значений температур электронов выше фермиевских на примере алюминия и золота.

Научная новизна работы. Предложена новая модель для описанию разрушения при высокоскоростном нагружении. Предложенная модель позволила рассматривать только ту часть образца, которая непосредственно находится на линии откола, что существенным образом увеличило число рассматриваемых в расчете атомов. Более того, такая постановка задачи позволила достичь экспериментальных значений скоростей деформации и провести непосредственное сравнение с известными экспериментальными данными. Было показано, что без учета индуцированной дефектной подсистемы откольная прочность имеет слабую зависимость от скорости деформирования. Учет индуцированной дефектной подсистемы, которая образуется в идеальном монокристалле после прохождения импульса сжатия, позволяет получить зависимость откольной прочности от скорости деформирования и объяснить увеличение откольной прочности с ростом скорости деформации.

Развита методика расчета коэффициента электронной теплопроводности в двухтемпературном случае. Впервые *ab-initio* вычислен коэффициент электронной теплопроводности в двухтемпературном случае. Была получена зависимость коэффициента теплопроводности от электронной температуры для жидкого алюминия для температуры превышающих фермиевскую.

Проведено исследование электронного давления для случая горячих электронов. Развита методика к разделению электронного давления на две составляющие: локализованную и делокализованную. Исследовано влияние горячих электронов на электронную плотность и силы, действующие на атомы.

Положения, выносимые на защиту

1. Модель откола в твердом теле, позволяющая рассчитать откольную прочность монокристаллических металлов. Зависимость откольной прочности монокристалла алюминия от скорости деформации.
2. Методика выделения давления свободных электронов и определения их концентрации в разогретых плотных металлах.
3. Метод расчета коэффициентов переноса электронной подсистемы в двухтемпературном случае в рамках теории функционала электронной плотности.
4. Зависимость двухтемпературного коэффициента теплопроводности алюминия и золота от электронной температуры в диапазоне от 0 до 6 эВ.

Практическая ценность работы заключается в том, что компьютерное исследование откольной прочности дают возможность лучше понять механизмы пластической деформации и разрушения при высокоскоростном деформировании. Рассчитанное давление горячих электронов и коэффициент теплопроводности горячих электронов могут быть использованы для создания новых моделей лазерной абляции.

Апробация работы Результаты диссертации докладывались на конферен-

циях: «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук» (МФТИ 2007, 2008, 2009, 2011, 2012); «Advanced Problems in Mechanics» (Санкт-Петербург 2008, 2009); «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем» (Москва 2008); «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество» и «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус 2009, 2010); «Физика прочности и пластичности материалов» (Самара 2009); «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Новый Афон 2009, 2012); «Joint U.S. Russia Conference on Advances in Materials Science» (Прага 2009); «Ультрамелкозернистые и наноструктурные материалы–2010» (Уфа 2010); «Theoretical Spectroscopy Lectures: Theory and Codes» (Лозанна 2011); «GW quasiparticle calculations in condensed matter physics and nanoscience» (Лозанна 2012); «Харитоновские чтения» (Саров 2012); «Исследования неидеальной плазмы» (Москва 2012, 2013, 2014); «Nucleation Theory and Applications» (Дубна 2013); «Mira Performance Boot Camp 2013» (Аргон 2013); «The XXVI IUPAP Conference on Computational Physics: CCP 2013» (Москва 2013).

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 10 статьях в реферируемых научных журналах, а также в сборниках и в тезисах российских и международных конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, изложенных на 104 страницах, включая 28 рисунков и библиографию из 134 наименований.

2 Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность, научная новизна и практическая значимость задач, решаемых в работе. Сформулированы цели работы и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава является обзорной. Кратко описывается метод молекулярной динамики и межатомные потенциалы, используемые при моделировании. Сделан обзор по основным работам, связанным с атомистическим моделированием высокоскоростной деформации. Дается введение в метод теории функционала плотности (ТФП). Обсуждается применение формулы Кубо-Гринвуда в рамках ТФП для расчета транспортных свойств. Дается обзор по основным работам, в которых использовалась формула Кубо-Гринвуда для ТФП. Глава 1 состоит из четырех параграфов.

В **параграфе 1.1** дается обзор метода молекулярно-динамического моделирования, применяемого для исследования физических процессов в веществе. Рассматриваются различные межатомные потенциалы, используемые для моделирования металлов. Кратко представлены методы для разработки потенциалов

взаимодействия частиц.

В **параграфе 1.2** обсуждается применение метода молекулярно-динамического моделирования к исследованию пластической деформации и разрушению при высокоскоростном деформировании. Основное внимание уделено пластической деформации за фронтом ударной волны. Также обсуждаются различия в прямом и косвенном моделировании ударно-волнового воздействия.

В **параграфе 1.3** дается введение в метод теории функционала плотности. Рассматриваются преимущества ТФП перед другими квантовомеханическими методами. Приводятся уравнения Кона-Шэма и обсуждаются основные его слабые стороны. Кратко рассматривается метод псевдопотенциала и обсуждаются преимущества его использования.

В **параграфе 1.4** рассматривается применение ТФП к расчету оптических и транспортных свойств. Дается краткий вывод формулы Кубо-Гринвуда [4]. Обсуждаются работы [5–7], где впервые была вычислена проводимость в рамках ТФП. Приводится сравнение результатов из ТФП с экспериментальными данными и расчетов из теории Займана. Так же приводится обзор работ, посвященных расчету оптических и транспортных свойств разогретого плотного вещества с помощью ТФП и формулы Кубо-Гринвуда. Особое внимание уделено вопросам сходимости и усреднению по наборам конфигураций.

Вторая глава посвящена исследованию пластической деформации и разрушения при высокоскоростном нагружении. В модели откола произведен учет дефектной подструктуры, сгенерированной первичной волной сжатия. Получена зависимость откольной прочности от скорости деформирования для монокристалла алюминия. Произведено сравнение с результатами ударно-волновых экспериментов. Исследовано влияние температуры на откольную прочность. Показано, что при высокоскоростном деформировании для монокристалла возможен заход за кривую плавления. В случае поликристалла перегрев оказался невозможен, так как при подходе к кривой плавления происходит аморфизация границ зерен, что делает возможным распространение трещин вдоль границ зерен, которая резко снижает прочность. Глава 2 состоит из двух параграфов.

В **параграфе 2.1** смоделированы условия, в которых пребывает объем монокристалла в результате прохождения волн сжатия и разрежения. При этом рассматривается только часть образца, находящаяся вблизи линии откола. Такой подход позволяет увеличить характерные времена расчета и пространственные масштабы интересующей нас области образца (где происходит разрушение и откол), а также существенно расширить диапазон скоростей деформирования по сравнению с моделью ударник–мишень [8], которая на прямую моделирует, как ударник, так и мишень.

Использовались две различные параметризации потенциала погруженного

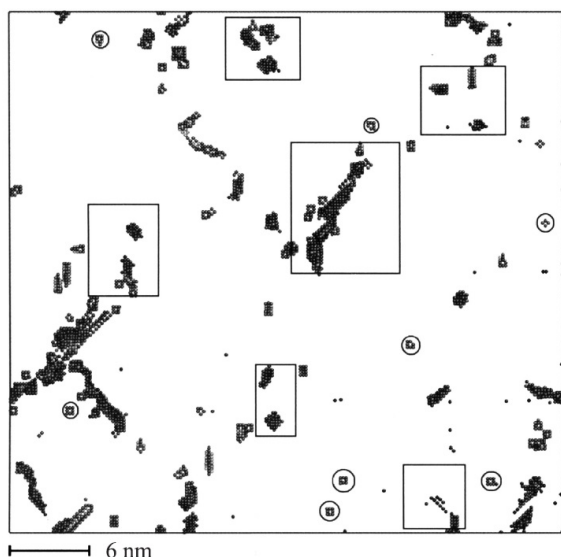


Рис. 1: Остаточные дефекты. Окружностями выделены вакансии, прямоугольниками — дислокационные петли. Показаны только атомы, составляющие дефекты кристалла (выделены на основе параметра центральной симметрии). Потенциал [9]. Количество атомов в системе $N = 2 \times 10^6$. Размер расчетной ячейки $100 \times 90 \times 80$ периодов решетки.

атома [9, 10]. Они различаются набором физических характеристик алюминия, по которым происходит верификация потенциалов. На расчетную ячейку накладываются трехмерные периодические граничные условия. Растяжение и сжатие моделируются масштабированием координат всех атомов и расчетной ячейки на каждом шаге численного интегрирования.

Все расчеты были проведены при $T = 100 \text{ K}$. Данная температура была выбрана для того, чтобы тепловые колебания атомов не препятствовали наблюдению дефектной структуры. Размер системы варьировался от 200 тыс. до 3 млн. атомов. Времена расчета лежали в диапазоне $10^2 - 10^4$ пс в зависимости от скорости деформирования. Все расчеты были проведены с помощью пакета программ LAMMPS [11].

Компьютерный эксперимент был разделен на три этапа. На первом этапе одноосное сжатие расчетной ячейки с постоянной скоростью моделирует процесс прохождения импульса сжатия. Условия одноосной деформации реализуются в быстропротекающих процессах, когда релаксация в поперечных направлениях не успевает реализовываться, так как в образце еще нет достаточного количества дефектов, которые могли бы обеспечить пластическую деформацию и релаксацию напряжений (как раз на этом этапе происходит их активное зарождение и размножение).

Второй этап соответствует релаксации, которая при ударно-волновом нагружении происходит в результате суперпозиции падающей волны сжатия и отраженной волны разрежения. В модели система проводится к нулевым напряжениям вдоль всех трех осей. Затем система выводилась на равновесие при $T = 100 \text{ K}$.

Третий этап — всестороннее растяжение — определяет эволюцию твердой фазы в области отрицательного давления при суперпозиции волн разрежения.

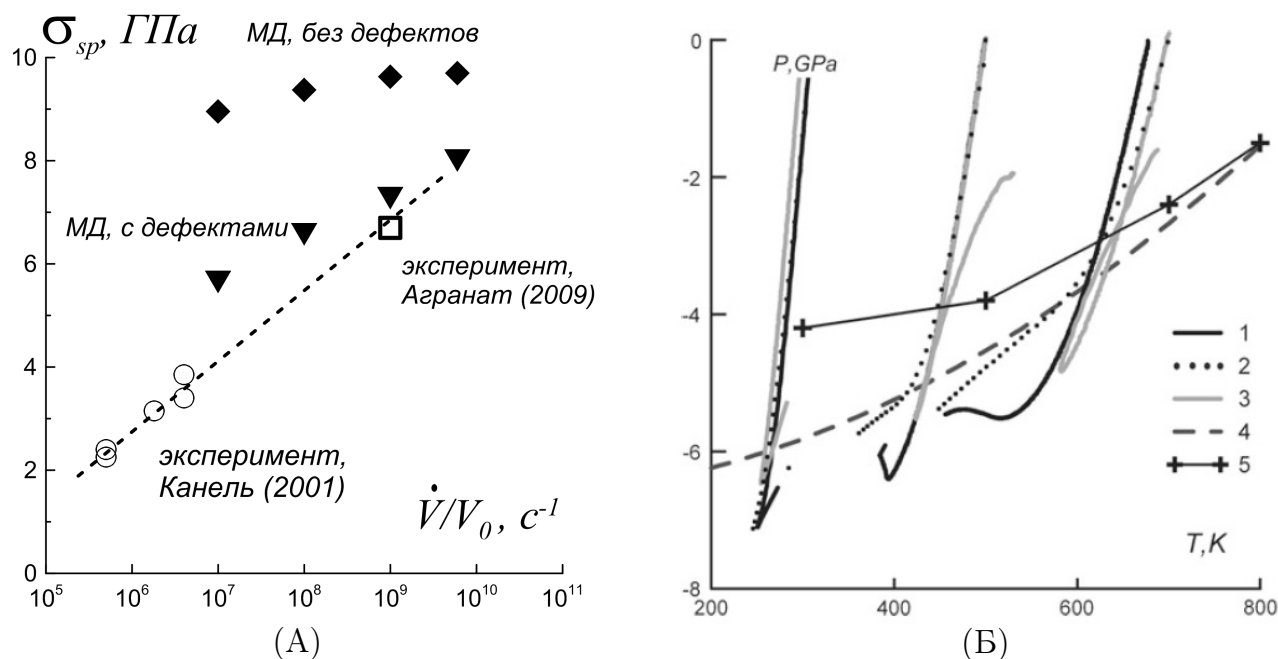


Рис. 2: (А) Зависимость откольной прочности от скорости деформирования. МД-моделирование всестороннего растяжения при постоянной температуре 300 К: перевернутые треугольники - модель с дефектами, образующимися при УВ-сжатии, потенциалы [9], ромбы — монокристалл без дефектов, потенциал [9], круги — экспериментальные данные для монокристалла алюминия [12], квадраты — экспериментальные данные для монокристалла алюминия при лазерном нагружении [13]. (Б) Фазовая диаграмма алюминия и термодинамическая траектория деформации в (P, T) координатах. Скорость деформации постоянна и равна $\dot{\epsilon} = 10^8 s^{-1}$. Приведены траектории для монокристалла с дислокацией (1), поликристалла (2) и монокристалла с полостью (3). Штриховая линия (4) - кривая плавления. Кресты (5) соответствуют напряжениям при которых происходило распространения трещины в границе зерна для бикристалла.

На этом этапе реализуется случай всестороннего растяжения, так как в структуре материала уже есть дефекты, обеспечивающие пластическую деформацию и снимающие девиаторные напряжения.

При малой степени деформации имеет место упругое сжатие, затем происходит пластическая деформация, появляются частичные дислокационные петли. Возникшая структура представляла собой множество пересекающихся плоских дефектов упаковки, окруженных петлями частичных дислокаций. После релаксации в образце оставалось существенно меньшее число дефектов по сравнению с их количеством в конце процесса одноосного сжатия на первом этапе. Они представляют собой вакансии, небольшие по размерам плоскости сдвига и дислокационные петли (рис. 1). Такие же остаточные дефекты наблюдаются и в МД-расчетах, где используется модель ударник-мишень [8]. Величина девиаторных напряжений, усредненная по расчетной ячейке, на этом этапе для расчетов с обеими модификациями потенциала не превышала 10 МПа, что недостаточно для движения дислокаций. Таким образом, движение дислокаций обеспечива-

лось не макроскопическим сдвиговым напряжением, а его локальной концентрацией. При достижении критического напряжения в процессе растяжения около плоскостей сдвига и в местах их пересечений образовывались полости, и начинался их рост.

Результаты моделирования показали, что в монокристалле алюминия в рассмотренном диапазоне скоростей пластическая деформация обусловлена появлением и ростом частичных дислокационных петель, а разрушение — зарождением полостей на дислокационных петлях (рис. 2А). Наличие дефектной структуры, возникающей при ударно-волновом нагружении, приводит к значительному падению откольной прочности и ее более резкой зависимости от скорости деформирования по сравнению с исходной монокристаллической структурой. Результаты расчетов откольной прочности монокристалла алюминия находятся в согласии с экспериментальными данными.

В **параграфе 2.2** обсуждаются вопросы перегрева монокристалла при высокоскоростном деформировании и сильной зависимости откольной прочности от скорости деформирования поликристалла вблизи кривой плавления.

На рис. 2Б изображена термодинамическая траектория в (P,T) координатах деформации алюминия с различной дефектной подсистемой (поликристалл, монокристалл, монокристалл с полостью). Наблюдается существенное отличие между поликристаллом и монокристаллом при приближении к кривой плавления. Монокристалл испытывает заметный перегрев даже при наличии дефектной подсистемы: дефекты упаковки, дислокации, полости (см. 2Б линий 1 и 3). Хотя процесс плавления и начинается на пересечениях дефектов упаковки, но полости, связанные с отколом, образуются в бездефектной части кристалла, и вклад расплава в разрушение является незначительным. Другая картина наблюдается в случае поликристалла: при гидростатическом растяжении для него не происходит перегрева (см.рис 2Б линия 2). Наличие границ зерен приводит к релаксации напряжений, что сдерживает процесс перегрева. Температура плавления повышается для малых размеров зерен, так как в этом случае существенным является вклад поверхностной энергии. Однако этот эффект не вносит существенного вклада для реальных образцов, в которых характерный размер зерна > 100 нм (в МД достижимы размеры порядка 10 нм).

По всей видимости, основной процесс, который препятствует перегреву поликристалла, связан с аморфизацией на границах зерен. В непосредственной близости к кривой плавления толщина аморфного слоя достигает порядка 1.5 нм и по своим физическим свойствам он становится близким к жидкости. Плавление границ зерен начинается еще до достижения кривой плавления, таким образом, можно сказать, что наблюдается эффект предплавления. На рис. 2Б линия 2 меняет свой наклон при приближении к кривой плавления (линия 4).

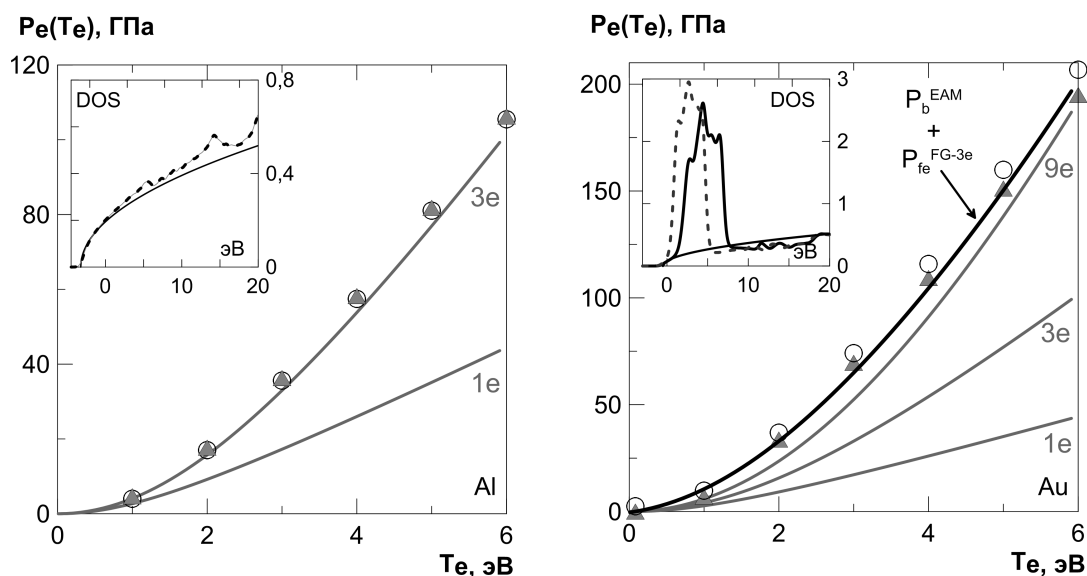


Рис. 3: Разность электронного давления $P_e(T_e) - P_e(0)$ для ГЦК Al (правый график) и ГЦК Au (левый график). Давление полученное из ТФП - VASP (круги), ABINIT (закрашенные треугольники). Серые линии - рост давление, полученных из модели свободных электронов с разным числом свободных электронов на элементарную ячейку. Черная кривая для золота - сумма P_c^{EAM} (давление, полученное из классического потенциала погруженного атома, зависимо от T_e) и P_{fe} (давление из модели свободных электронов с 3 электронами на элементарную ячейку). Включенные графики - плотность состояний. Черные кривые - плотность состояний при $T_e = 0$ эВ, штриховые - при $T_e = 6$ эВ. Так же показана плотность состояний для модели свободных электронов с 3 электронами на элементарную ячейку.

Откольная прочность поликристалла, полученная в компьютерных экспериментах, сравнима с откольной прочностью жидкости. Маловероятно, что в реальных экспериментах происходит гомогенная нуклеация полостей на границах зерен. Однако, можно предполагать наличие зародышей в виде микротрещин и пузырей, которые изначально присутствуют в границах зерен, что приводит к существенному понижению энергетического барьера для роста полостей и, как следствие, к уменьшению величины откольной прочности.

Третья глава посвящена исследованию давления горячих электронов в двухтемпературном состоянии для ГЦК алюминия и золота. На примере алюминия и золота анализируется электронный вклад в полное давление металлов в двухтемпературном состоянии плотного разогретого вещества. Затем рассматривается вопрос о разделении электронов на связанные и свободные (локализованные и делокализованные) - данная проблема является крайне важной для физики неидеальной плазмы, построения уравнений состояния, для моделей, описывающих взаимодействия излучения с веществом, описания треков быстрых тяжелых ионов и других областей физики экстремальных состояний. Глава 3 состоит из трех параграфов.

В **параграфе 3.1** обсуждается проблема описания неравновесного двухтемпературного состояния вещества. Считается, что двухтемпературное разо-

гретое плотное вещество (2Т РПВ) находится в состоянии квазиравновесия и его свободная энергия представима в виде суммы слагаемых: $F(\rho, T_e, T_l) = E_c + F_l + F_{fe}$; где ρ - плотность вещества, T_e - температура электронной подсистемы, T_l - температура ионной подсистемы, E_c - энергия когезии, F_l - термическая часть свободной энергии решетки, F_{fe} - термическая часть свободной энергии свободных(ионизированных, делокализованных) электронов. Соответствующее разложение давления тогда имеет вид:

$$P = P_c + P_l + P_{fe}. \quad (1)$$

Первое слагаемое P_c так называемое "холодное давление" и зависит только от плотности $P_c = P_c(\rho)$, второй член - кинетическое электронное давление $P_{fe} = P_{fe}(n_{fe}, T_e)$ (n_{fe} - плотность свободных электронов) и последнее слагаемое - тепловое давление решетки $P_l = P_l(\rho, T_e)$. Предполагается, что кинетическое давление электронов эквивалентно давлению свободных электронов P_{fe} . Очевидная сложность в расчете P_{fe} связана с тем, что для его определения необходимо знать плотность свободных электронов n_{fe} (степень ионизации). Однако, для некоторых состояний вещества представление (1) является некорректным.

В **параграфе 3.2** приводятся результаты расчета электронного давления для ГЦК золота и алюминия в рамках ТФП. Также проводится сравнение полученных результатов с моделью свободных электронов. Так как в данной работе рассматриваются температуры $T_e \sim T_F$, что делает невозможным применения низкотемпературного разложения для химического потенциал, поэтому химический потенциал вычисляется путем численного решения интегрального уравнения, связывающего химический потенциал и число свободных электронов. Сравнение двух моделей показало, что для ГЦК алюминия рост электронного давления, связанный с ростом T_e , хорошо описывается моделью свободных электронов с тремя свободными электронами на атома. Для золота же $P(T_e)$ существенно хуже описывается моделью свободных электронов: наиболее близкие значения дает модель с девятью электронами на атом. Это противоречие разрешается, если учесть зависимость потенциала межатомного взаимодействия от электронной температуры.

Потенциал погруженного атома, зависящий от электронной температуры [14], дает зависимость холодного давления $P_c(T_e)$. Из-за значительной разности $P^{DFT} - P^{EAM}$ [14] (P^{DFT} - давление в расчетах методом ТФП, P^{EAM} - давление, полученное в расчетах с потенциалом погруженного атома, зависящего от T_e) можно предположить, что делокализованные электроны не дают вклада в силы, действующие на атомы, поэтому давление, полученное в рамках температурно зависящего потенциала погруженного атома, относится к холодному давлению и целиком определяется вкладом локализованных электронов. Рост $P_e(T_e) - P_e(0)$

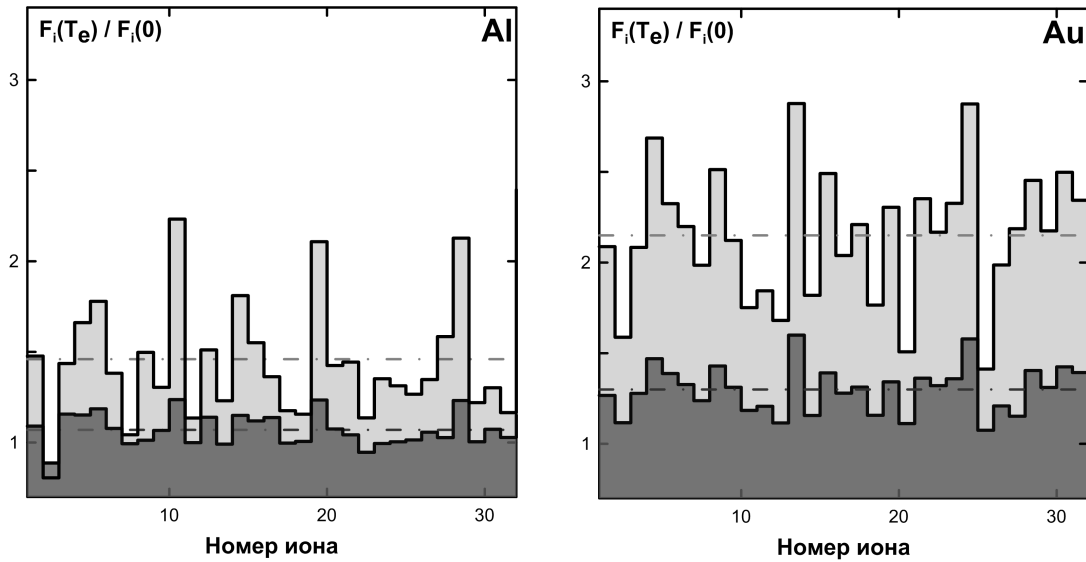


Рис. 4: Относительное увеличение сил, действующие на ионы, с ростом T_e . Правый график - Al, левый график - Au. Рассматривались разупорядоченные конфигурации (32 атома в расчетной ячейке). Темная закрапка $T_e = 3$ эВ, серая закрапка - $T_e = 6$ эВ. $F(0)$ рассчитывалась для $T_e = 0.08$ эВ

в золоте хорошо описывается суммой $P_{EAM} + P_{fe}$, где давление в модели свободных электронов взято при электронной плотности, соответствующей 3 ± 0.3 электронов на атом (см. рис. 3). Сравнение плотности электронных состояний для модели свободных электронов с такой плотностью достаточно хорошо описывает делокализованную часть плотности состояний, полученной в рамках КТ ТФП (рис. 3)

В работе Bevilion с соавторами [15] был использован другой метод для оценки числа свободных электронов n_{fe} в 2Т РПВ золоте. Он заключался в интерполяции плотности состояний, полученных в ТФП, плотностью состояний, вычисленной в модели свободных электронов. Для ГЦК золота такой подход дает оценку $n_{fe} = 2.4 - 3.5$ в том же диапазоне T_e . Зависимость холодного давления от T_e указывает на непосредственную зависимость самого уравнения состояния от T_e , откуда следует, что представление (1) возможно использовать для ограниченного числа материалов, таких как алюминий, где можно пренебречь зависимостью P_c и P_l от T_e . В общем случае все три слагаемые в (1) зависят от T_e и для их описания 2Т РПВ требуется разработка специальных методов.

В **параграфе 3.3** обсуждается вопрос влияния электронной температуры на силы, действующие на атомы. Увеличение жесткости связи в ГЦК золоте приводит к росту фоновых частот и холодного давления P_c [16]. Отсюда следует, что при увеличении T_e меняется поверхность потенциальной энергии, которая отвечает за динамику ионов. Однако из-за симметрии ГЦК решетки силы, действующие на атомы, всегда равны нули при любых электронных температурах. Поэтому для изучения влияния T_e на силы, действующие на атомы, были рас-

смотрены разупорядоченные атомные структуры. Конфигурации были получены из *ab-initio* молекулярно-динамического моделирования при $T_l = T_e = 2000\text{ K}$. На рис. 4 показано, как увеличение сил в 2Т РПВ золоте при увеличении T_e существенно превосходит увеличение сил в 2Т РПВ алюминий. Это еще один пример эффекта жесткой связи в Au.

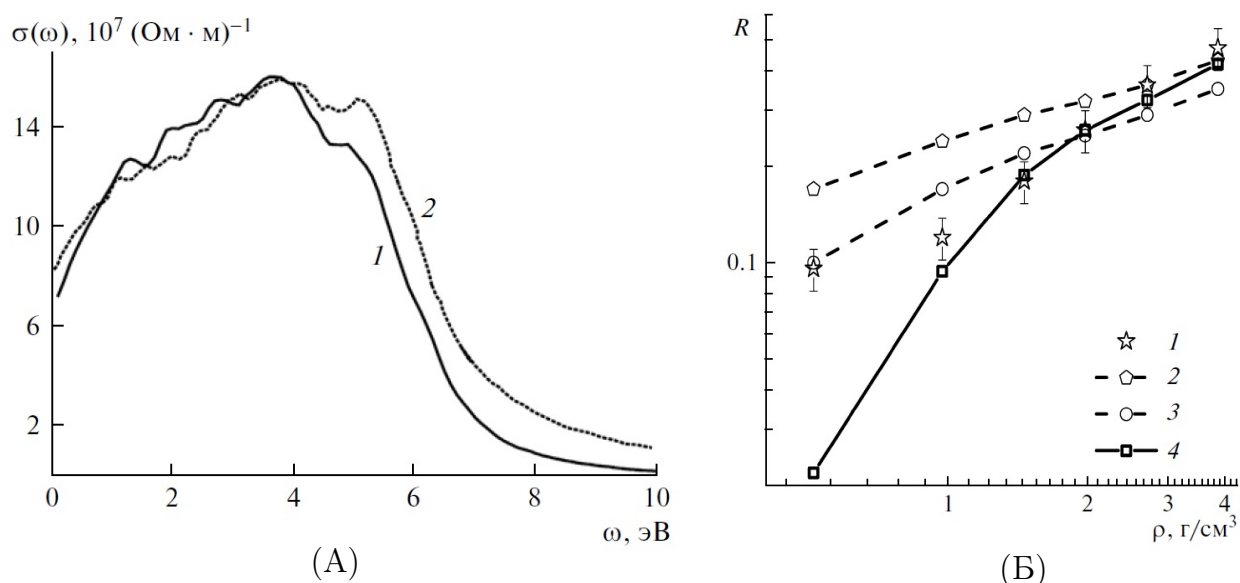


Рис. 5: (А) Оптическая проводимость алюминия при $\rho = 0.5\text{ г/см}^3$, $T_i = T_e = 20000\text{ K}$. 2 - результаты [17]. (Б) Зависимость коэффициента отражения от плотности для длины волны 1064 нм: 1 - эксперимент [18], 2 - результаты расчета [19], 3 - результаты [19], полученные с введением поправок на ширину энергетической щели между свободными и связанными состояниями, 4 - результаты настоящей работы.

Четвертая глава посвящена расчету коэффициента теплопроводности в двухтемпературном разогретом плотном веществе. В начале главы описываются методы расчета проводимости и коэффициента теплопроводности в рамках теории функционала плотности. Приводятся примеры верификации метода на примере расчета статической электропроводности жидкого алюминия, динамической электропроводности алюминиевой плазмы, коэффициента отражения плотной ксеноновой плазмы. Рассчитывается двухтемпературный коэффициент теплопроводности при фиксированной температуре решетки T для алюминия при $T_l = 2000$ и золота при $T_l = 300\text{ K}$. Четвертая глава состоит из 3 параграфов.

В **параграфе 4.1** описывается метод расчета оптических и транспортных свойств вещества на основе теории функционала плотности (ТФП) и формулы Кубо-Гринвуда. Метод состоял из трех этапов. Для получения равновесной ионной конфигурации проводили расчеты методом квантовой молекулярной динамики (КМД) с помощью программного пакета VASP, который использует метод псевдопотенциала и базис плоских волн. На втором этапе с помощью па-

кета ABINIT рассчитывали электронную структуру при фиксированных координатах ионов, полученных на предыдущем этапе. Пакет ABINIT аналогичен пакету VASP, но в него включен модуль для расчета оптических и транспортных свойств. Однако пакет ABINIT имеет более низкую производительность. Поэтому для первого этапа был взят пакет VASP. Третий этап расчета представлял собой вычисление оптической проводимости и коэффициента теплопроводности в рамках формализма Кубо–Гринвуда. Полученные величины усреднялись по набору ионных конфигураций.

Схема расчета теплопроводности в двухтемпературном и изотермическом случаях принципиально не отличаются. Единственным отличием являлась разная температура электронов и ионов в двухтемпературных расчетах.

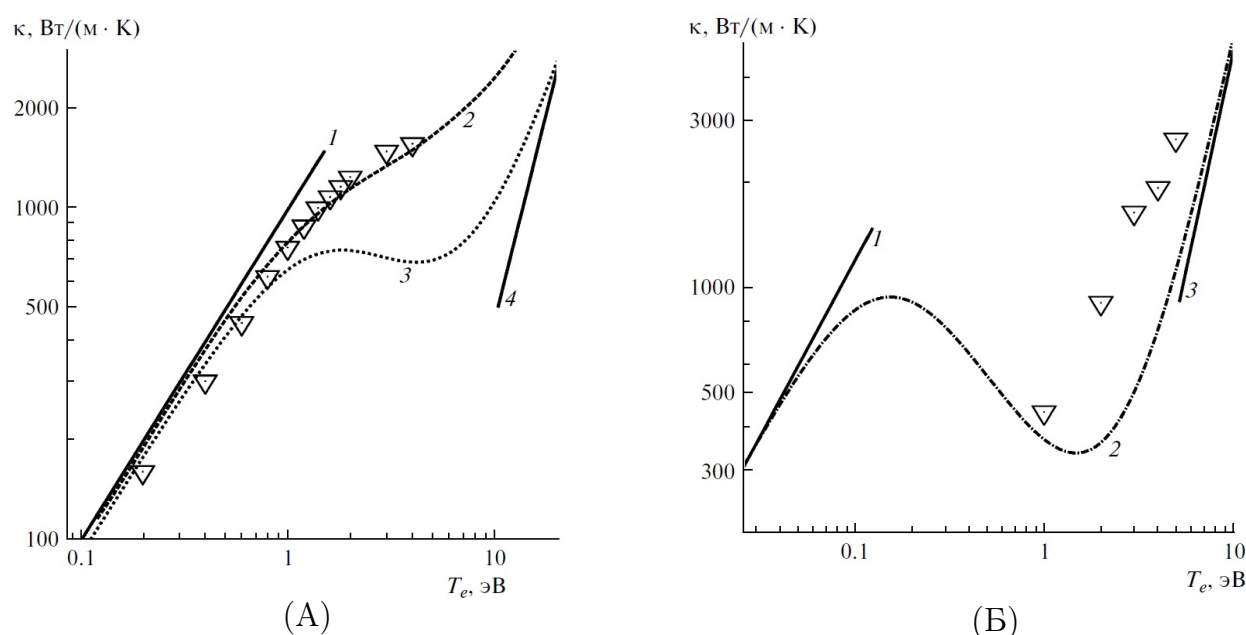


Рис. 6: (А) Зависимость коэффициента теплопроводности алюминия от электронной температуры при $\rho = 2.35 \text{ г/см}^3$, $T_i = 2000 \text{ К}$. Точки - результаты данной работы, 1 - низкотемпературная асимптотика, 2 - данные [20], 3 - модель из работы [2], 4 - спитцеровская асимптотика $K(T_e) \sim T_e^{5/2}$. (Б) Зависимость коэффициента теплопроводности золота от электронной температуры при $\rho = 19.32 \text{ г/см}^3$, $T_i = 300 \text{ К}$. Точки - результаты данной работы, 1 - низкотемпературная асимптотика, 2 - модель из работы [3], 3 - спитцеровская асимптотика.

Параграф 4.2 посвящен проверке описанного выше метода в изотермическом случае. В качестве первых тестовых расчетов были проведено моделирование жидкого алюминия выше точки плавления при температуре 1000 К и плотности 2.35 г/см^3 . Полученные ионные конфигурации хорошо согласуются с экспериментально измеренной парно-корреляционной функцией. Статическая проводимость жидкого алюминия рассчитывается экстраполяцией оптической проводимости к нулю частоты. Полученная проводимость равна $\sigma = 4.0 \times 10^6 (\text{Ом м})^{-1}$, что хорошо согласуется с экспериментальным значением

$\sigma = 3.97 \times 10^6 (\text{Ом м})^{-1}$. Рассчитанная величина теплопроводности составляет $K = 90 \text{ Вт}/(\text{м К})$, что близко к экспериментальной $K = 98 \text{ Вт}/(\text{м К})$.

На рис. 5А представлено сравнение с результатами работы [17], где использовали схожий подход к расчету кинетических коэффициентов, для плотности $0.5 \text{ г}/\text{см}^3$ и температуры $T_e = T_i = 20\,000 \text{ К}$. Небольшое расхождение обусловлено тем, что расчеты [17] проведены с использованием другого псевдопотенциала из библиотеки пакета VASP.

Так же были проведены расчеты по коэффициенту отражения от плотной ксеноновой плазмы для длины волны падающего излучения $\lambda = 1064 \text{ нм}$. На рис. 5Б представлены результаты расчета коэффициента отражения лазерного излучения (точки 2 - 4, соединенные линиями) и экспериментальные данные (звездочки 1). Пятиугольники 2, соединенные пунктирной линией 2, соответствуют результатам расчета [19]. Рост значений коэффициента отражения при увеличении плотности, полученный в данной работе, заметно выше по сравнению с [19]. При этом абсолютные значения [18] значительно превышают результаты, рассчитанные в данной работе в области для $\rho < 3 \text{ г}/\text{см}^3$ (при наименьшем значении плотности в 8 раз), и в 2 раза превосходят измеренные значения [19]. В целом наблюдается хорошее согласие с экспериментальными данными и другими теоретическими исследованиями.

В **параграфе 4.3** рассчитывается двухтемпературный коэффициент теплопроводности. На рис. 6А представлена рассчитанная зависимость коэффициента теплопроводности от температуры электронов для алюминия при плотности $2.35 \text{ г}/\text{см}^3$ и температуре ионов $T_i = 2000 \text{ К}$. При температуре электронов менее 1 эВ полученная в данной работе зависимость, расчеты [2] и модель [3] совпадают. Наблюдается согласие с низкотемпературной асимптотикой $K(T_e) \sim T_e$. При температуре электронов выше 1 эВ модель [3] дает заниженные результаты в сравнении с рассчитанной зависимостью и расчетами [2].

Расчеты по золоту были проведены при плотности $19.32 \text{ г}/\text{см}^3$ и температуре ионов 300 К. Температура электронов изменялась в диапазоне 0.03 - 6.00 эВ. Результаты представлены на рис. 6Б. Полученная зависимость согласуется с [3] при температуре электронов более 1 эВ. Таким образом, развитая методика расчета коэффициента теплопроводности металлов в двухтемпературном случае дает с известными данными. Полученные результаты могут быть использованы в качестве входного параметра двухтемпературной модели лазерной абляции.

3 Основные результаты и выводы работы

Исследовано воздействия импульсов высоких энергий на конденсированную фазу методами классической молекулярной динамики и теорией функционала плотности. Найдены прочностные характеристики металлов при ударно-волновом нагружении, кинетические коэффициенты в режиме лазерного нагрева и электронное давление. Получены следующие результаты:

1) Показано, что учет индуцированной ударной волной дефектной подсистемы позволяет объяснить экспериментально наблюдаемую зависимость откольной прочности монокристалла алюминия от скорости деформирования.

2) Установлено, что увеличение температуры электронов приводит не только к увеличению давления свободных электронов, но и к изменению вклада давления связанных электронов в полное давление. Предложен метод разделения электронов на свободные и связанные.

3) Построена модель расчета проводимости и коэффициента теплопроводности по формуле Кубо-Гринвуда в рамках теории функционала плотности.

4) Рассчитана двухтемпературная зависимость коэффициента теплопроводности для алюминия (до 4 эВ) и золота (до 6 эВ).

4 Публикации автора по теме диссертации

В реферируемых научных журналах:

1. Жилиев П.А., Куксин А.Ю., Стегайлов В.В., Янилкин А.В. Влияние пластической деформации на разрушение монокристалла алюминия при ударно-волновом нагружении // Физика Твердого Тела, 2010, Т. 52, N. 8, С. 1508–1512

2. Kuksin A.Y., Norman G.E., Stegailov V.V., Yanilkin A.V., Zhilyaev P.A. Dynamic fracture kinetics, influence of temperature and microstructure in the atomistic model of aluminum // International Journal of Fracture, 2010, V. 162, N. 1-2, P. 127–136

3. Янилкин А.В., Жилиев П.А., Куксин А.Ю., Норман Г.Э., Писарев В.В., Стегайлов В.В. Применение суперкомпьютеров для молекулярно-динамического моделирования процессов в конденсированных средах // Вычислительные методы и программирование, 2010, Т. 11., С. 111–116

4. Жилиев П.А., Стегайлов В.В. Ab-initio молекулярная динамика: перспективы использования многопроцессорных и гибридных суперэвм // Вычислительные методы и программирование, 2012, Т. 13, С. 37–45

5. Norman G. E., Starikov S. V., Stegailov V. V., Saitov I.M., Zhilyaev P.A. Atomistic Modeling of Warm Dense Matter in the Two-Temperature State // Contributions to Plasma Physics, 2013, V. 53, N 2, P. 129–139

6. Norman G. E., Saitov I.M., Stegailov V.V., Zhilyaev P.A. Atomistic Modelling and Simulation of Warm Dense Matter. Conductivity and Reflectivity // Contributions to Plasma Physics, 2013, V. 53, N 4–5, P. 300–310

7. Жилиев П.А., Норман Г. Э., Стегайлов В.В. Первопринципный расчет теплопроводности металлов с горячими электронами // Доклады Академии Наук, 2013, V. 451, N 6, С. 629–633

8. Жилиев П.А., Норман Г.Э., Сaitов И.М., Стегайлов В.В. Применение теории функционала плотности к расчету коэффициента отражения от ударно сжатого ксенона // Доклады Академии Наук, 2013, V. 451, N 2, С. 151–155

9. Zhilyaev P.A., Stegailov V.V. Pressure in electronically excited warm dense metals // Contributions to Plasma Physics, 2015, DOI:10.1002/ctpp.201400103

10. Norman G.E., Saitov I.M., Stegailov V.V., Zhilyaev P.A. Ab-initio calculation of shocked xenon reflectivity // Phys. Rev. E, 2015, V. 91, N 2, P. 023105

Список литературы

- [1] Канель Г., Разоренов С., Уткин А., Фортон В. Ударно-волновые исследования в конденсированных средах. М.: Янус-К, 1996. 400 с.
- [2] Иногамов Н. А., Петров Ю. В. Теплопроводность металлов с горячими электронами // ЖЭТФ. 2010. Т. 137, № 3. С. 505–529.
- [3] Ivanov D. S., Zhigilei L. V. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. P. 064114.
- [4] Moseley L. L., Lukes T. A simplified derivation of the Kubo-Greenwood formula // Am. J. Phys. 1978. Vol. 46, no. 6. P. 676–677.
- [5] Allen P. B., Broughton J. Q. Electrical Conductivity and Electronic Properties of Liquid Silicon // J. Phys. Chem. 1987. Vol. 91. P. 4964–4970.
- [6] Galli G., Martin R. M., Car R., Parrinello M. Ab initio calculation of properties of carbon in the amorphous and liquid states // Phys. Rev. B. 1990. Vol. 42. P. 7470.
- [7] Sivistrelli P. L., Alavi A., Parrinello M. Electrical-conductivity calculation in ab initio simulations of metals: Application to liquid sodium // Phys. Rev. B. 1997. Vol. 55, no. 23. P. 15514.
- [8] Стегайлов В. В., Янилкин А. В. Структурные превращения в монокристаллическом железе при ударно-волновом сжатии и растяжении. Исследование методом молекулярной динамики // ЖЭТФ. 2007. Vol. 131. P. 1064.
- [9] Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A. et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63. P. 224106.
- [10] Liu X., Ercolessi F., Adams J. B. Aluminium interatomic potential from density functional theory calculations with improved stacking fault energy // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2004. Vol. 12, no. 4. P. 665–670.
- [11] Plimpton S. J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. Vol. 117. P. 1–19.
- [12] Kanel G. I., Razorenov S. V., Baumung K., Singer J. Dynamic yield and tensile strength of aluminum single crystals at temperatures up to the melting point // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 90. P. 136.
- [13] Агранат М. Б., Анисимов С. И., Жаховский В. В. и др. Прочностные свойства расплава алюминия в условиях экстремально высоких темпов растяжения при воздействии фемтосекундных лазерных импульсов // Письма в ЖЭТФ. 2010. Т. 91, № 9. С. 517–523.
- [14] Норман Г., Стариков С. В., Стегайлов В. В. Атомистическое моделирование лазерной абляции золота: эффект релаксации давления // ЖЭТФ. 2012. Т. 141, № 5. С. 910–918.
- [15] Bévilion E., Colombier J.-P., Recoules V., Stoian R. Free-electron properties of metals under ultrafast laser-induced electron-phonon nonequilibrium: A first-principles study // Physical Review B. 2014. Vol. 89, no. 11. P. 115117.
- [16] Recoules V., Clérouin J., Zérah G. Effect of intense laser irradiation on the lattice stability of semiconductors and metals // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 055503, no. 2. P. 1–4.
- [17] Desjarlais M. P., Kress J. D., Collins L. A. Electrical conductivity for warm, dense aluminum plasmas and liquids // Phys. Rev. E. 2002. Vol. 66. P. 025401.
- [18] Mintsev V. B., Zaporozhets Y. B. Reflectivity of Dense Plasma // Contribs Plasma Phys. 1989. Т. 29, № 4/5. С. 493–501.
- [19] Desjarlais M. P. Density functional calculations of the reflectivity of shocked xenon with ionization based gap corrections // Contrib Plasm Phys. 2005. Vol. 45, no. 3-4. P. 300–304.
- [20] Иногамов Н. А., Жаховский В. В., Ашитков С. И. и др. О нанотокле после воздействия ультракороткого лазерного импульса // ЖЭТФ. 2008. Т. 134, № 1. С. 5–28.

Жиляев Пётр Александрович

Атомистическое моделирование воздействия импульсных
энерговкладов на конденсированную фазу:
нагрев электронов и откольное разрушение

Подписано в печать Х.Х.Х
Формат 60 × 84 Усл. печ. л. 1,2
Тираж 100 экз. Заказ 41