

Ученый совет ОИВТ РАН

30 июня 2014 г.

**Атомистическая теория и моделирование
конденсированного состояния
и неидеальной плазмы:
результаты и перспективы**

В.В.Стегайлов

Зав. отделом 1.2.2



Вещество состоит из атомов

Если бы из-за некоей катастрофы все накопленные научные знания были бы уничтожены, и для последующих поколений живых существ сохранилось лишь одно предложение, то какое содержало бы наибольшую информацию при наименьшем количестве слов? Я считаю, что это — *атомная гипотеза* (или *атомный факт*, или как вам угодно его называть): *все тела состоят из атомов — маленьких частиц, которые пребывают в бесконечном движении и притягиваются друг к другу, когда их разделяет небольшое расстояние, но отталкиваются, если их прижимают плотнее друг к другу.* Как видите, в одном этом предложении *огромное* количество информации о мире, если только к нему приложить немного размышления и воображения.

Ричард Фейнман

Дюжина лекций. Шесть попроще и шесть посложнее (1963)

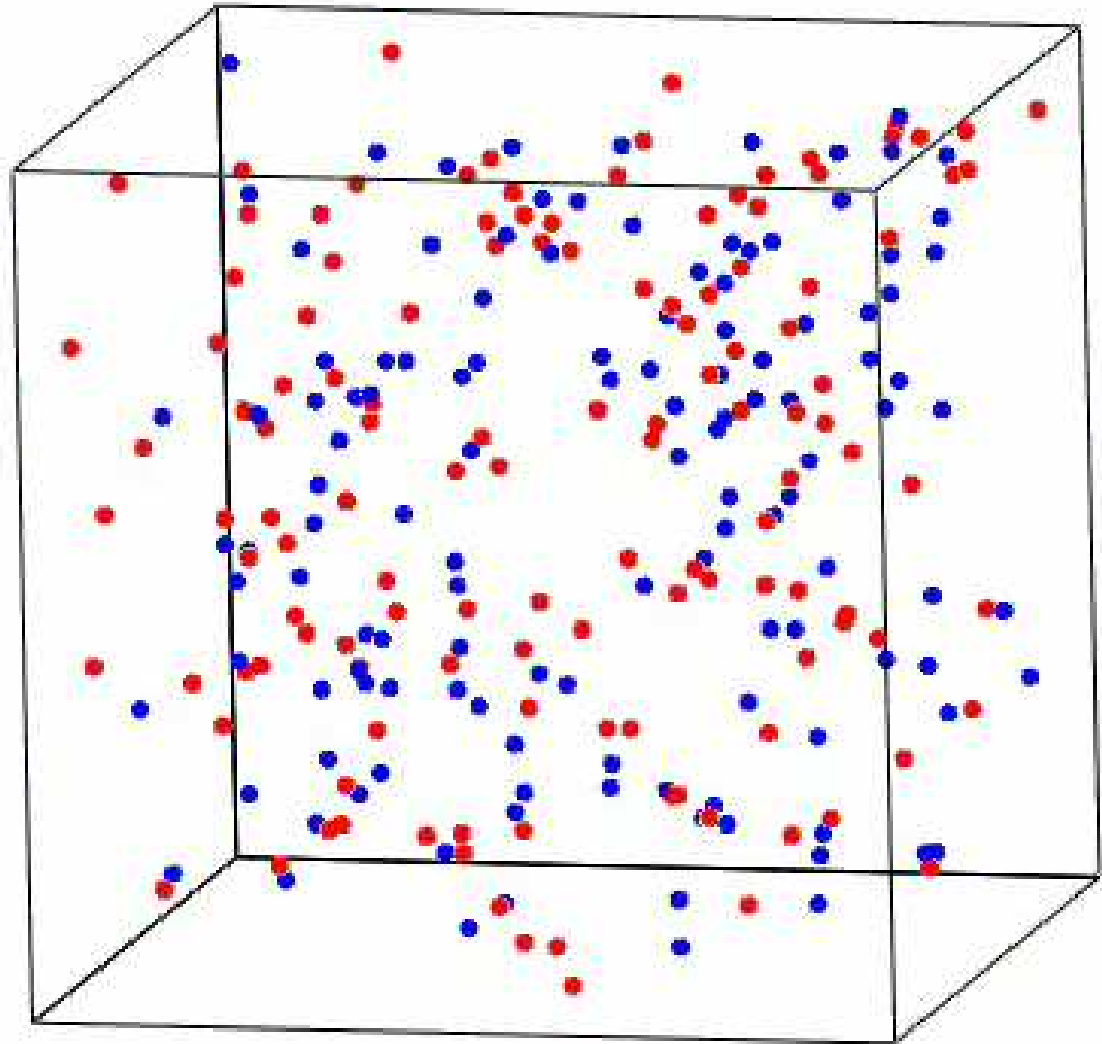
План доклада

1. Атомистические подходы. Метод частиц и молекулярная динамика
2. Квантово-механическое описание электронной системы. Ab initio методы
3. Пластичность. Разрушение. Нуклеация
4. Фазовые диаграммы
5. Многомасштабные задачи.
Диффузионные явления.

Классический метод молекулярной динамики

Численное решение
уравнений движения
Ньютона
для N частиц

$$m_i \frac{d\vec{v}_i(t)}{dt} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$



Предмет *статистической физики*, или, как говорят для краткости, просто *статистики*, составляет изучение особого типа закономерностей, которым подчиняются поведение и свойства макроскопических тел, т. е. тел, состоящих из колоссального количества отдельных частиц — атомов и молекул.

Составляя уравнения движения механической системы в числе, равном числу степеней свободы, и интегрируя их, мы принципиально можем получить исчерпывающие сведения о движении системы. Однако если нам приходится иметь дело с системой, хотя и подчиняющейся законам классической механики, но обладающей колоссальным числом степеней свободы, то при практическом применении методов механики мы сталкиваемся с необходимостью составить и решить такое же число дифференциальных уравнений, что представляется, вообще говоря, практически неосуществимым. Следует подчеркнуть, что если бы даже и можно было проинтегрировать в общем виде эти уравнения, то совершенно невозможно было бы подставить в общее решение начальные условия для скоростей и координат всех частиц.

при весьма большом числе частиц появляются новые своеобразные закономерности.

Эти — так называемые *статистические* — закономерности, обусловленные именно наличием большого числа составляющих тело частиц, ни в какой степени не могут быть сведены к чисто механическим закономерностям. Их специфичность проявляется в том, что они теряют всякое содержание при переходе к механическим системам с небольшим числом степеней свободы. Таким образом, хотя движение систем с огромным числом степеней свободы подчиняется тем же законам механики, что и движение систем из небольшого числа частиц, наличие большого числа степеней свободы приводит к качественно новым закономерностям.

Статистические закономерности
имеют смысл
для механических систем
3 и более частиц

Пространственные ограничения

$$N_i > nr_{ci}^3$$

$$r_{c1} < r_{c2} < r_{c3} < r_{c4} < \dots$$

$$N_1 < N_2 < N_3 < N_4 < \dots$$

$$L > \lambda_{\max}$$

Кооперативные явления (плазменные волны, нуклеация, дислокации, образование трещин, длинноволновые флуктуации)

Временные ограничения

$$\tau_{c1} < \tau_{c2} < \tau_{c3} < \dots$$

$$L^2 > D\tau_c, \quad L > a_s\tau_c$$

Вывод: выбор размера системы (числа частиц)
ограничивает

(а) предельные значения r_c , τ_c , λ и т. п.,
иными словами: (б) явления и процессы,

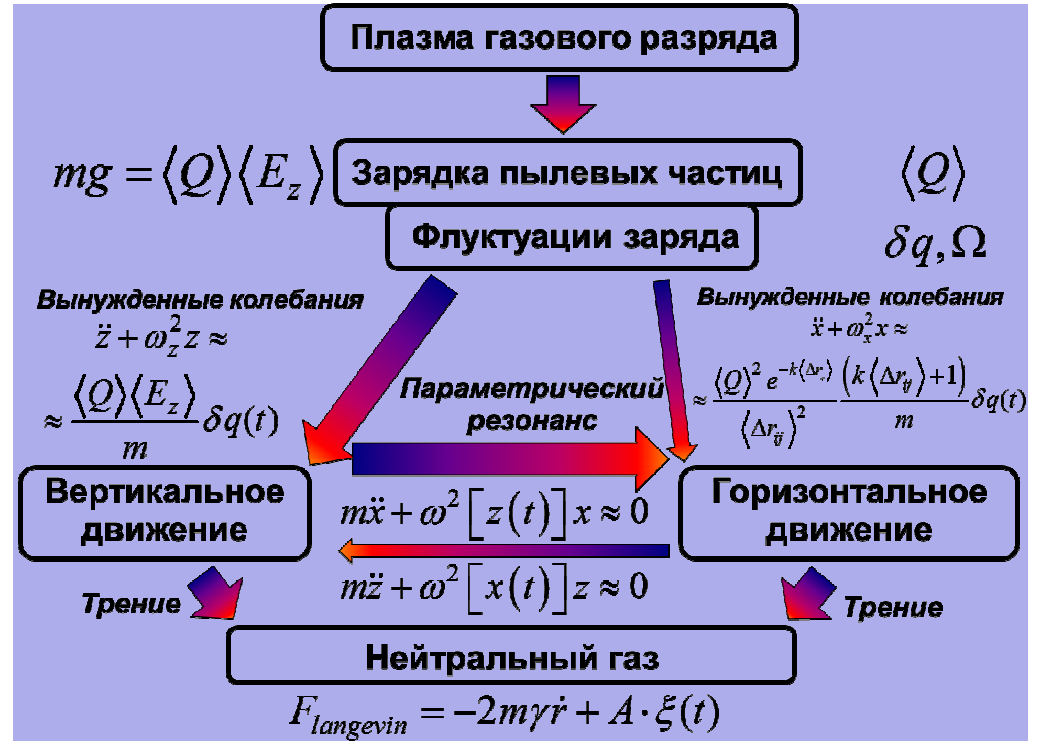
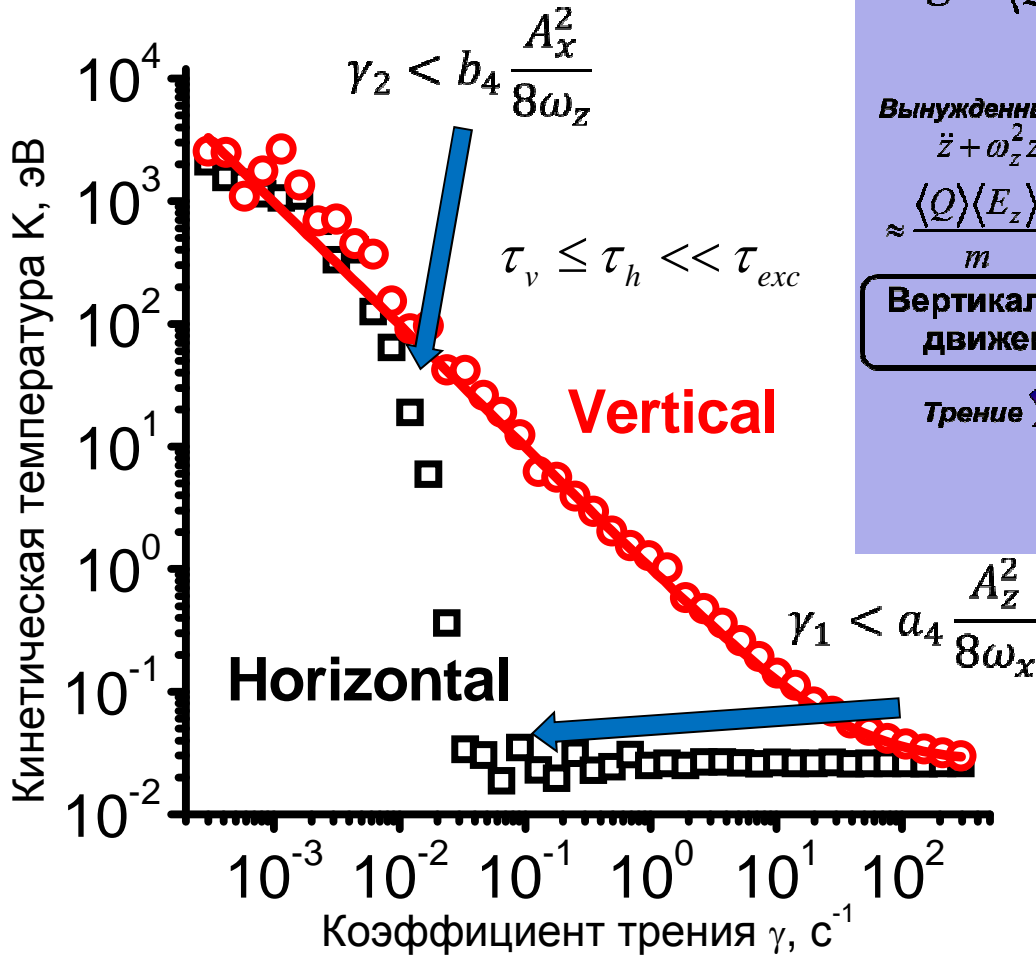
которые можно исследовать
(стандарты требований).



Параметрический резонанс.

Механизм разогрева колебаний пылевых частиц и переноса энергии между степенями свободы

Зависимость кинетической температуры от коэффициента трения пылевых частиц о нейтральный газ



$$A_z^2 - A_x^2 \approx \frac{\gamma \omega_z}{b_4} > 0$$

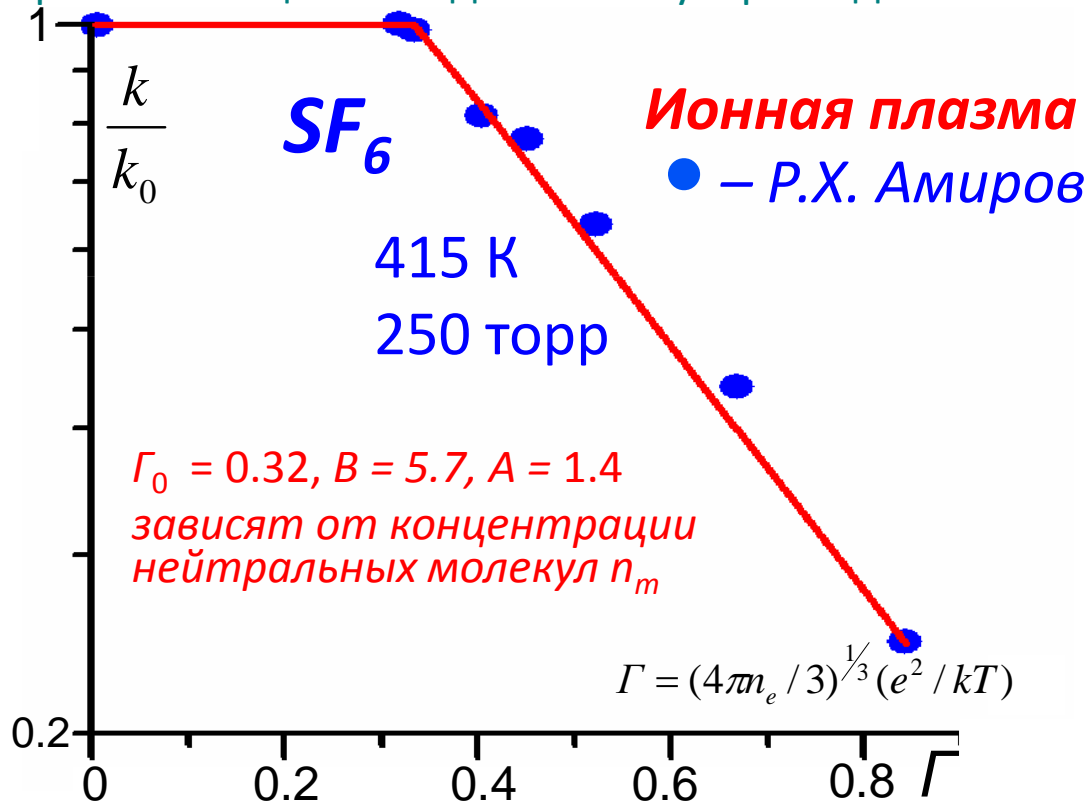
Г. Э. Норман, В.В. Стегайлов, А.В. Тимофеев // ЖЭТФ **140**, вып.5 (2011)
 G. Norman, A. Timofeev // Phys.rev.E **84**, 5 (2011)
 Г.Э. Норман, А.В. Тимофеев. // ДАН **446**, 4 (2012)

Рекомбинация зарядов. Формула Ланкина

подавление неидеальностью, $\Gamma > \Gamma_0$ k – коэффициент рекомбинации в неидеальной плазме, k_0 – в идеальной

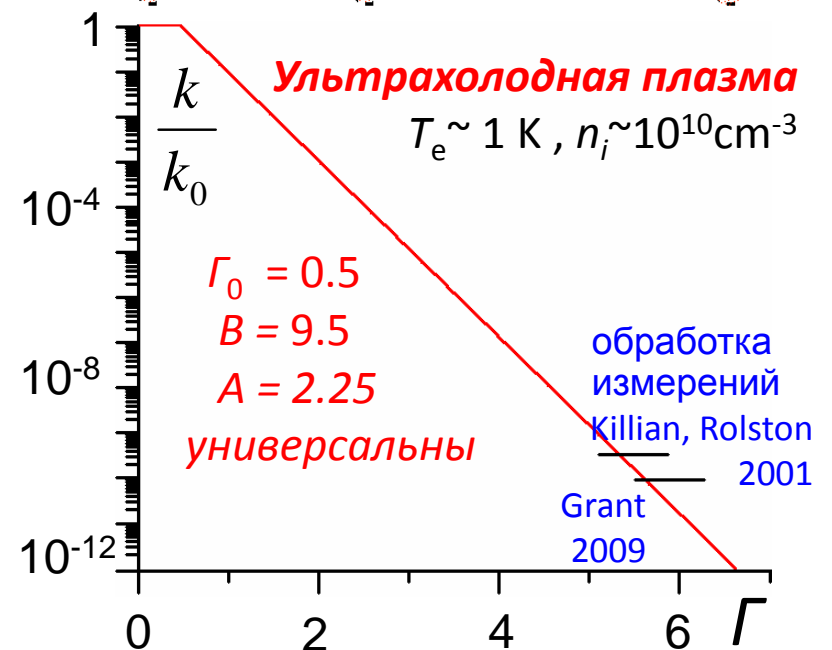
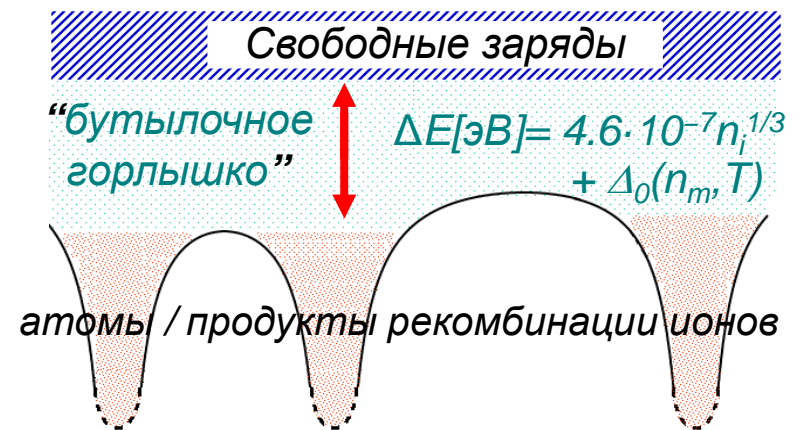
$$\frac{k}{k_0} = B \exp\left(-\frac{A \cdot \Delta E}{kT}\right) = B \exp(-2A\Gamma)$$

Значения A , B и Γ_0 определяются при расчёте рекомбинации методом молекулярной динамики



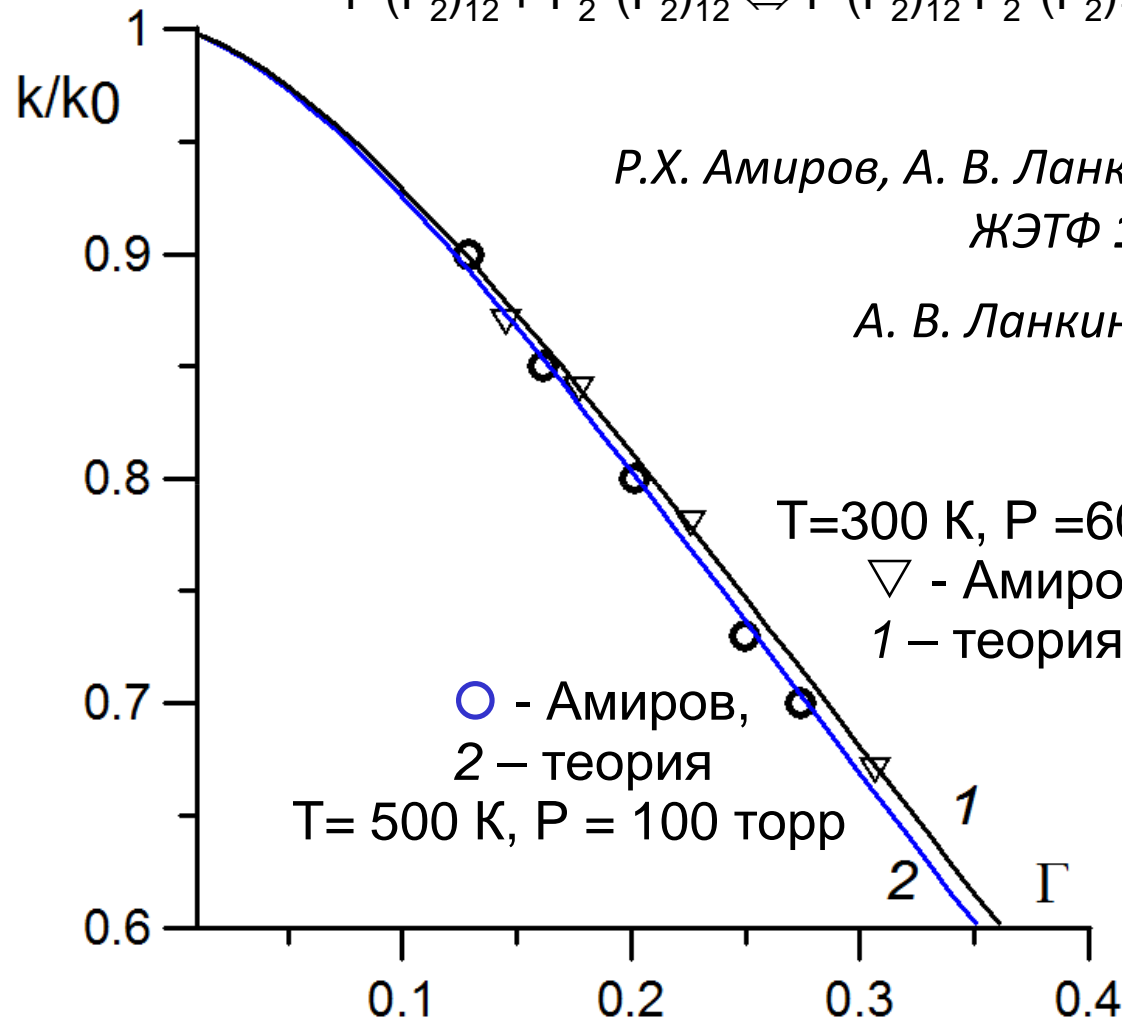
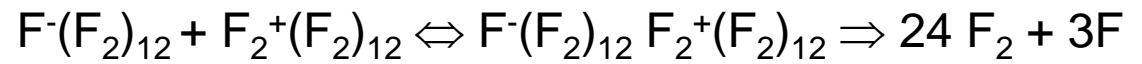
Р.Х. Амиров, А. В. Ланкин, Г. Э. Норман. ЖЭТФ **146**, вып.8 (2014)
 A.Lankin, G.Norman. Contrib. Plasma Phys. **53**,711(2013), **49**,723(2009)
 A. Lankin, G. Norman. J.Phys.A: Math. and Theor. **42**, 214042 (2009)
 А. В. Ланкин. ЖЭТФ **134**, 1013 (2008)

Аррениусова природа формулы





Подавление сольватацией, F_2



Р.Х. Амиров, А. В. Ланкин, Г. Э. Норман.
*ЖЭТФ **146**, вып.8 (2014)*

А. В. Ланкин. ЖФХ, в печати

$$\Gamma = (4\pi n_e / 3)^{1/3} (e^2 / kT)$$

**Квантово-механическое
описание электронной
системы.
Ab initio методы**

Теория функционала плотности

N-электронная в.ф.

$$\Psi(\vec{r}^N)$$



теорема Хоэнберга-Кона

Одноэлектронная
плотность

$$n(\vec{r})$$



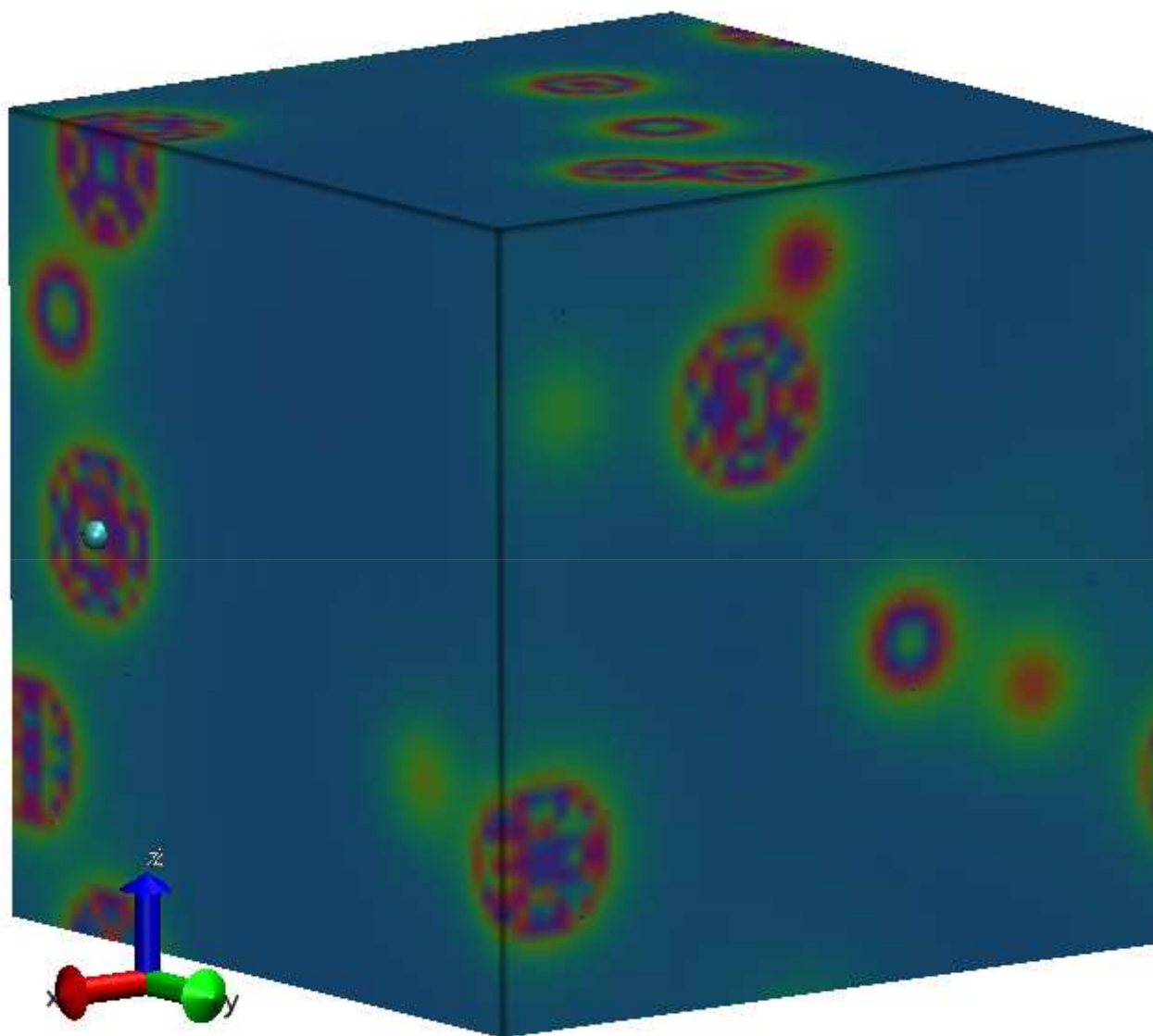
схема Кона-Шэма

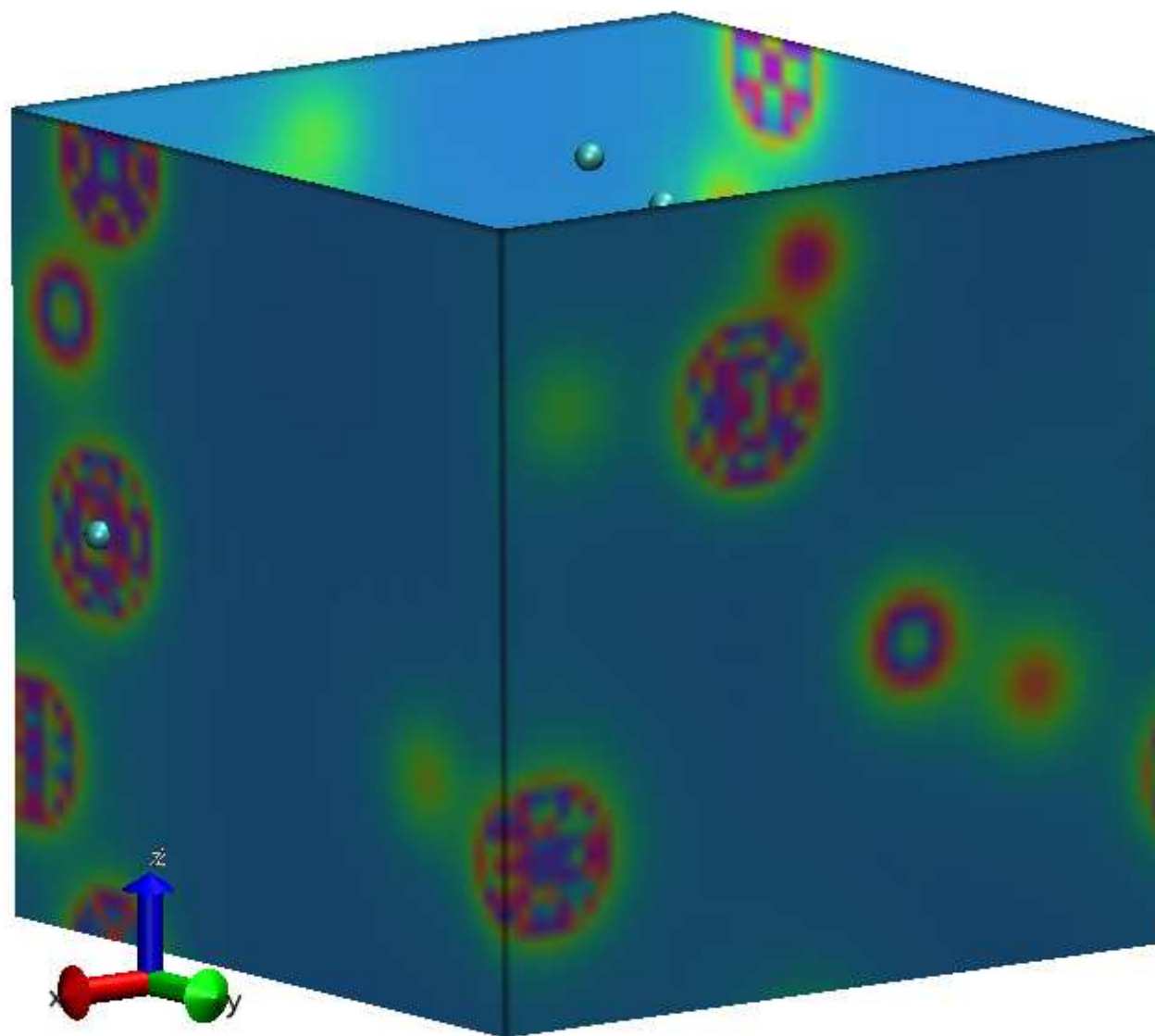
N одноэлектронных
орбиталей

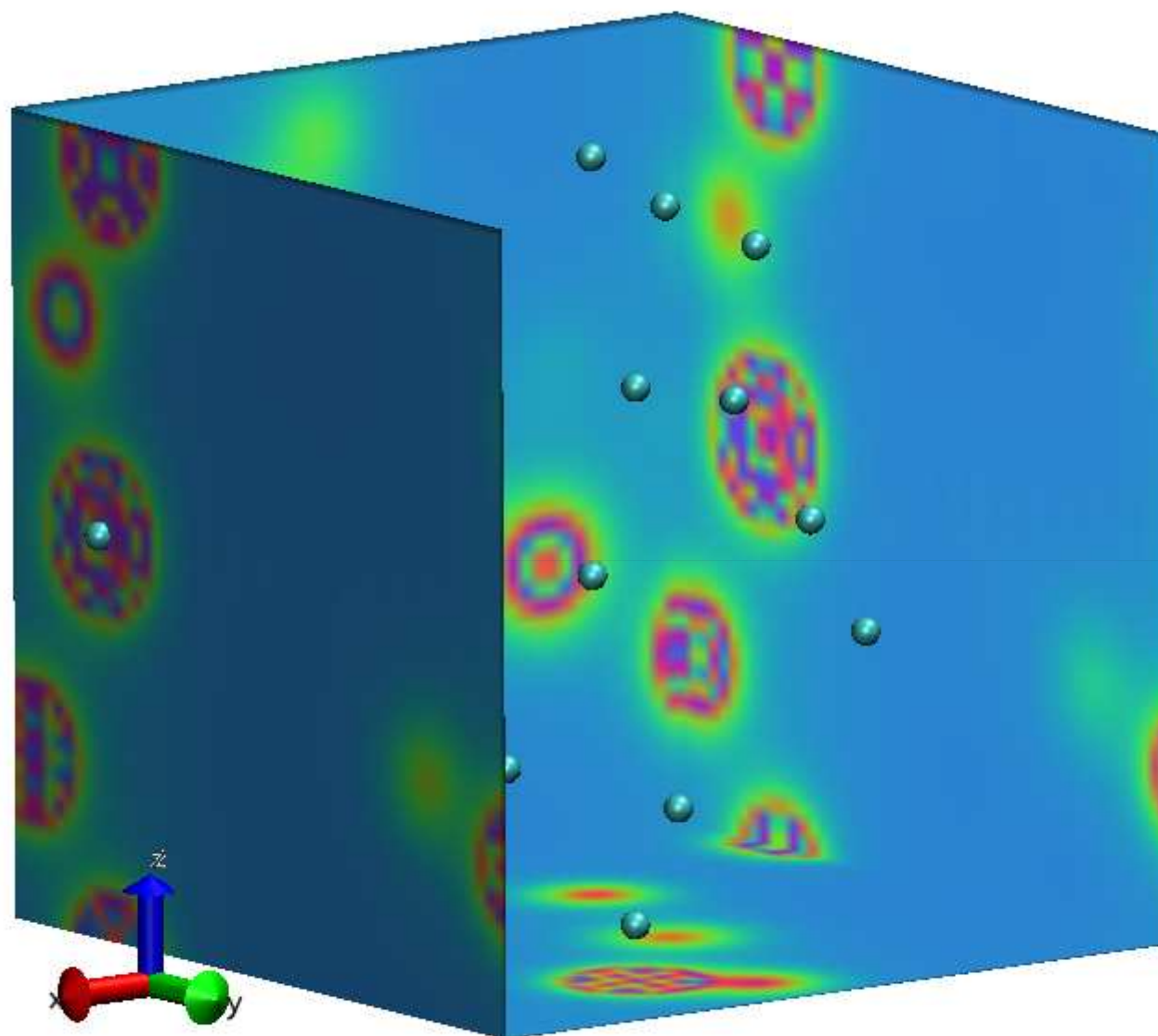
$$\Phi_1(\vec{r}), \dots, \Phi_N(\vec{r})$$

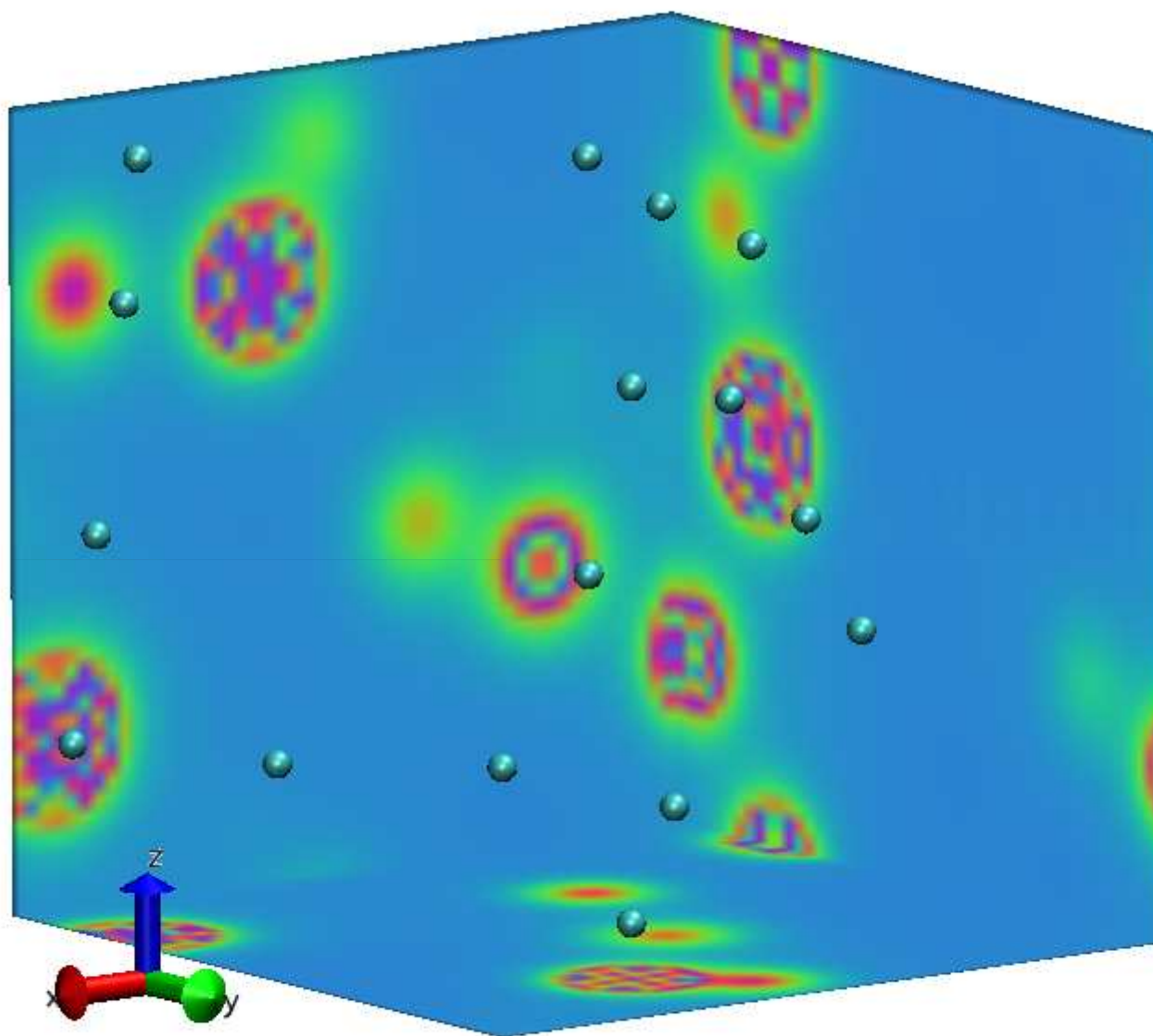
Связь:

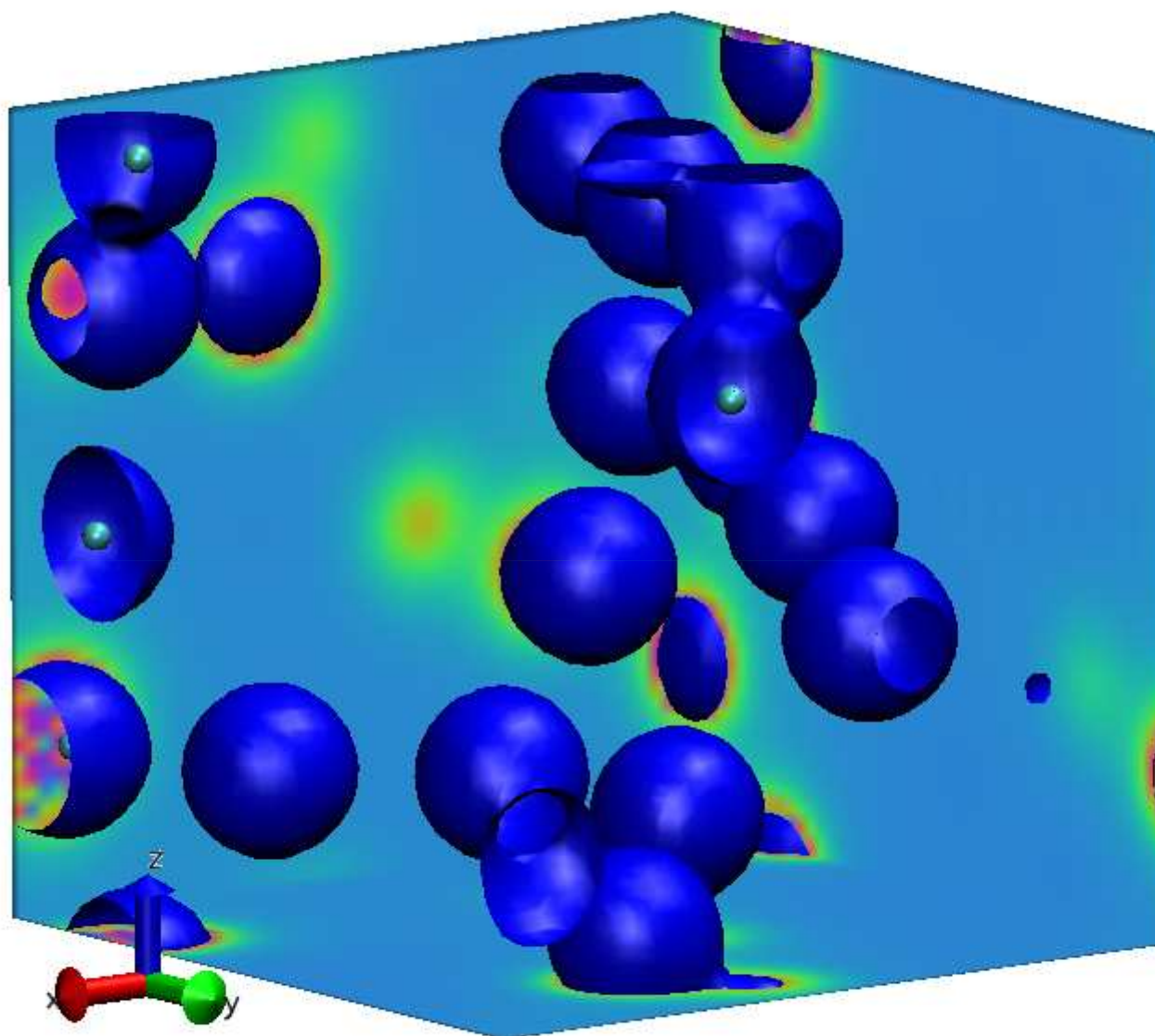
$$N_e \int d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N |\Psi(\vec{r}, \vec{r}_2 \dots \vec{r}_N)|^2 = n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\Phi_i(\vec{r})|^2$$

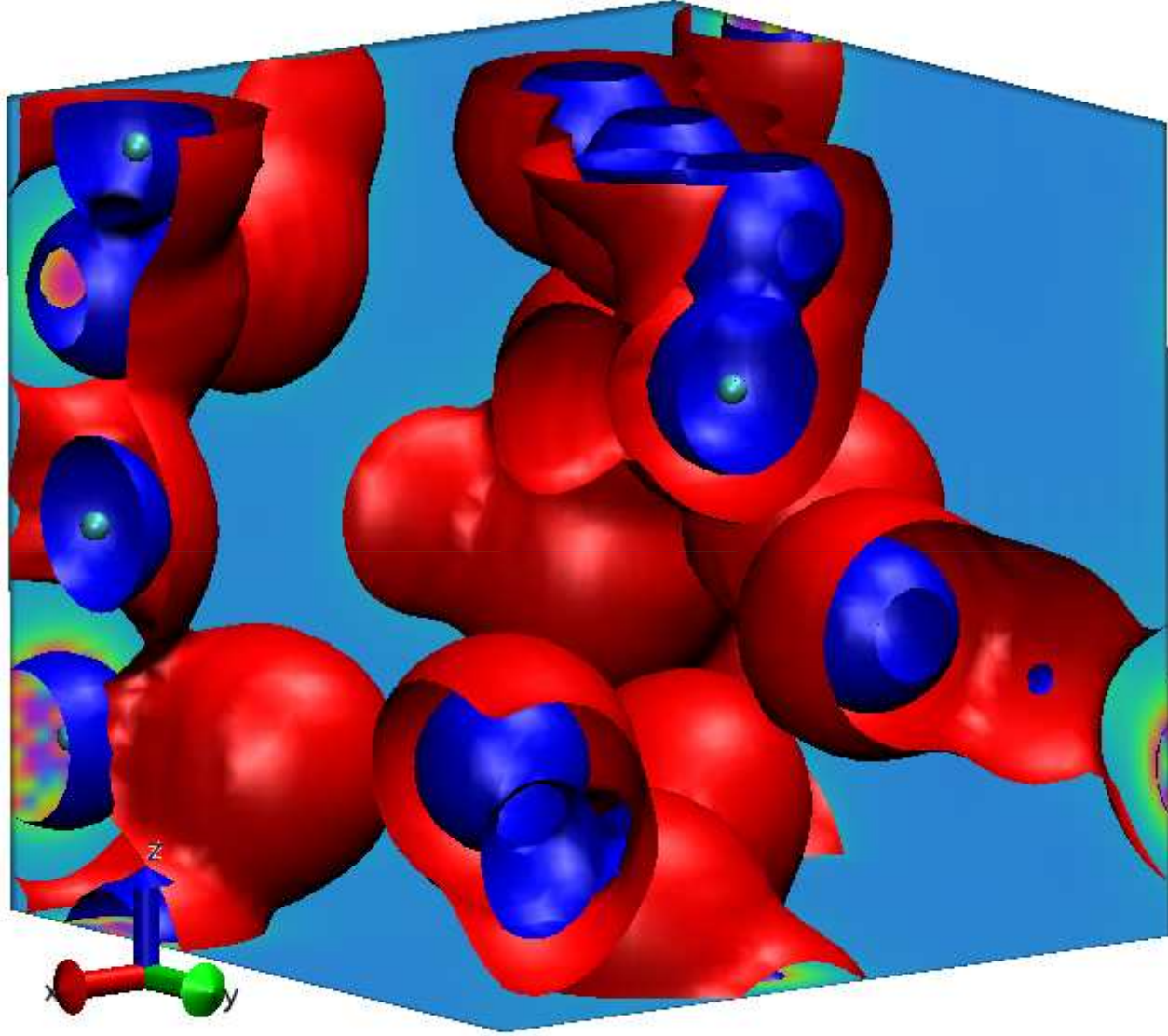




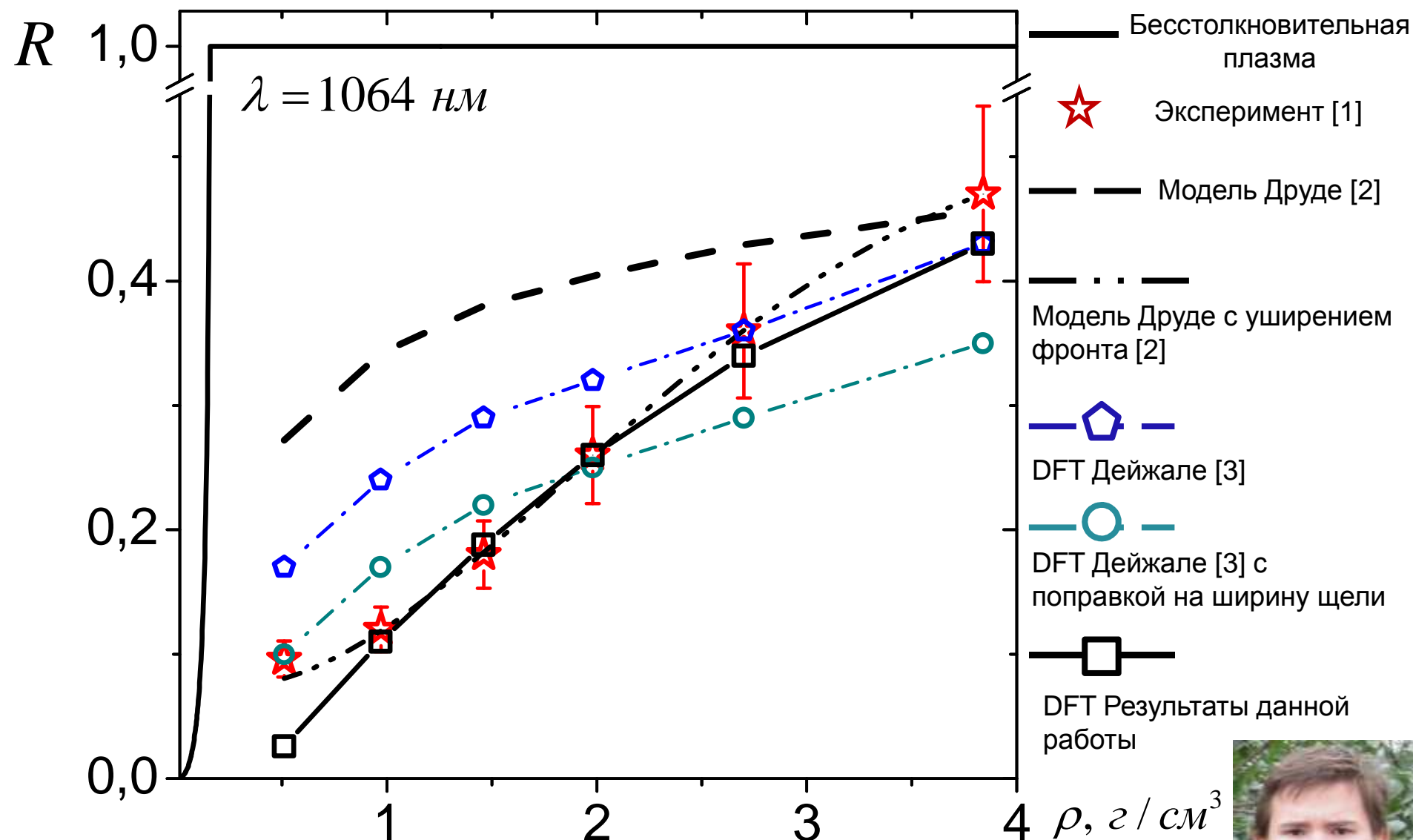








Зависимость коэффициента отражения от плотности



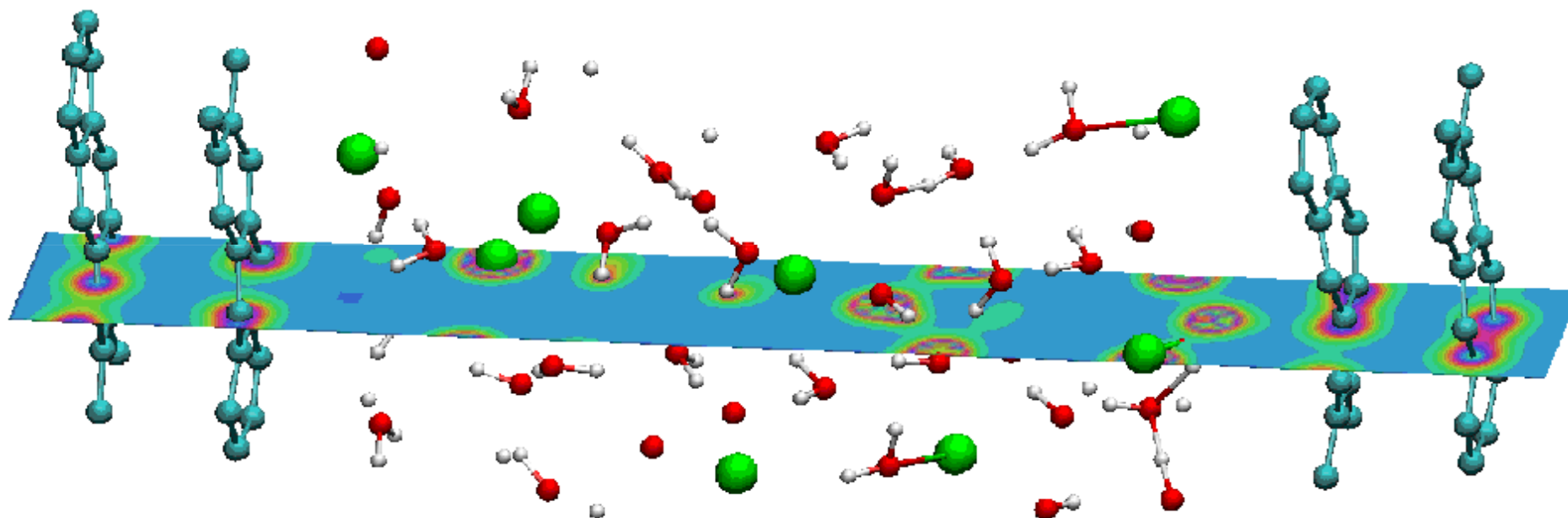
[1] V.B. Mintsev, Yu.B. Zaporozhets, Contrib. Plasma Phys. **29**, 493 (1989).

[2] H. Reinholz, G. Röpke, A. Wierling, V. Mintsev, and V. Gryaznov, CPP **43**, 3 (2003)

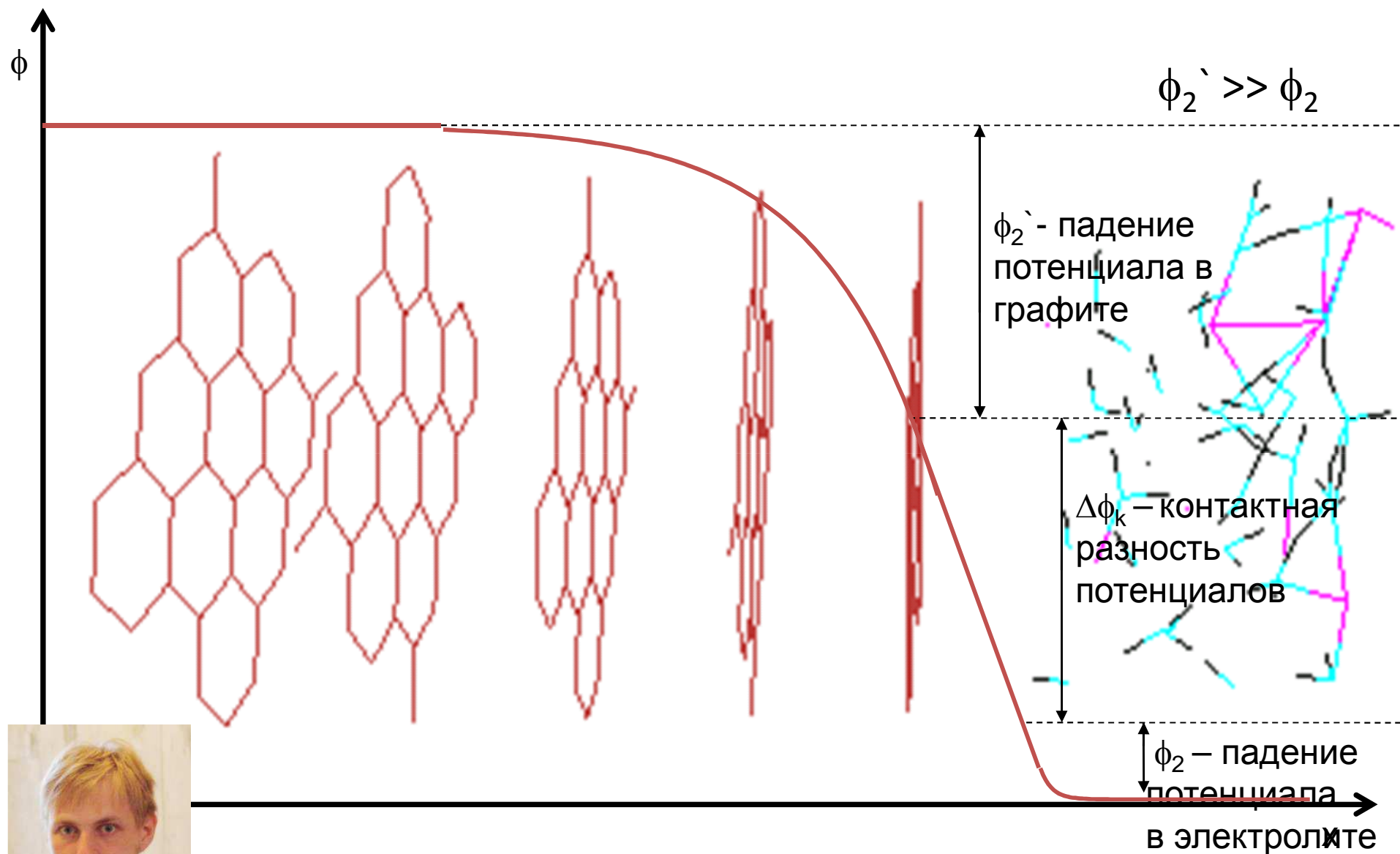
[3] M.P. Desjarlais, Contrib. Plasma Phys. **45**, 300 (2005).



Объемный электрический двойной слой в модельной поре графита, наполненной электролитом



Двойной электрический слой на границе графит-электролит



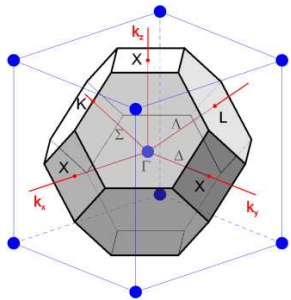
Сравнение с экспериментальными данными *

Тип материала электрода	Предельная ёмкость, $\mu\text{F}/\text{cm}^2$
Результаты молекулярно-динамического моделирования	3
Высокоориентированный пиролитический графит, скол	3
Пиролитический графит, скол	12
Пиролитический графит, полированный	60
Высокоориентированный пиролитический графит, полированный	50-70

* Jean-Paul Randin and Earnest Yeager, 1971

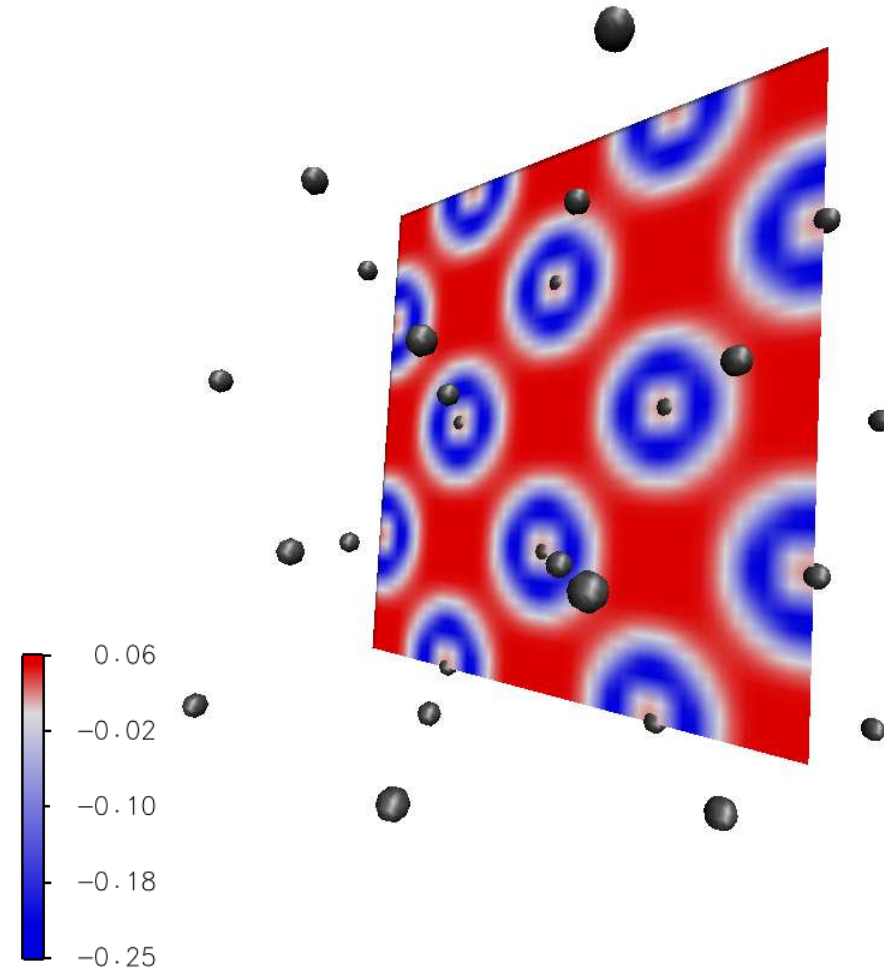
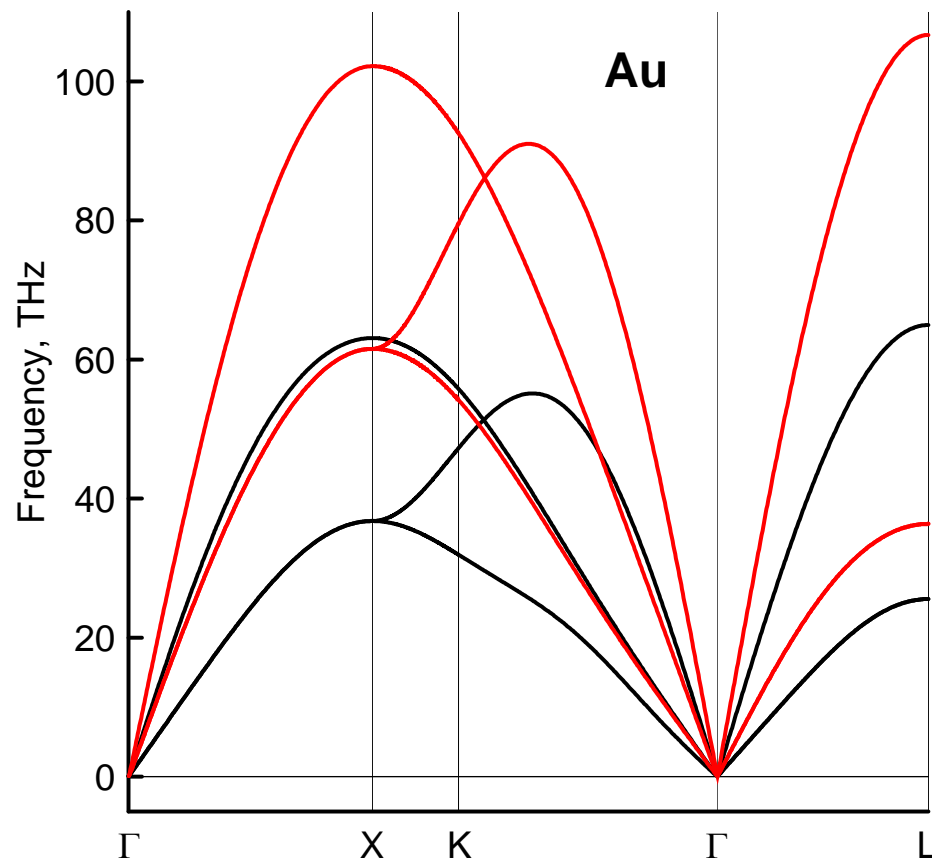
Перераспределение электронной плотности в металле при нагреве электронной подсистемы

гцк Au



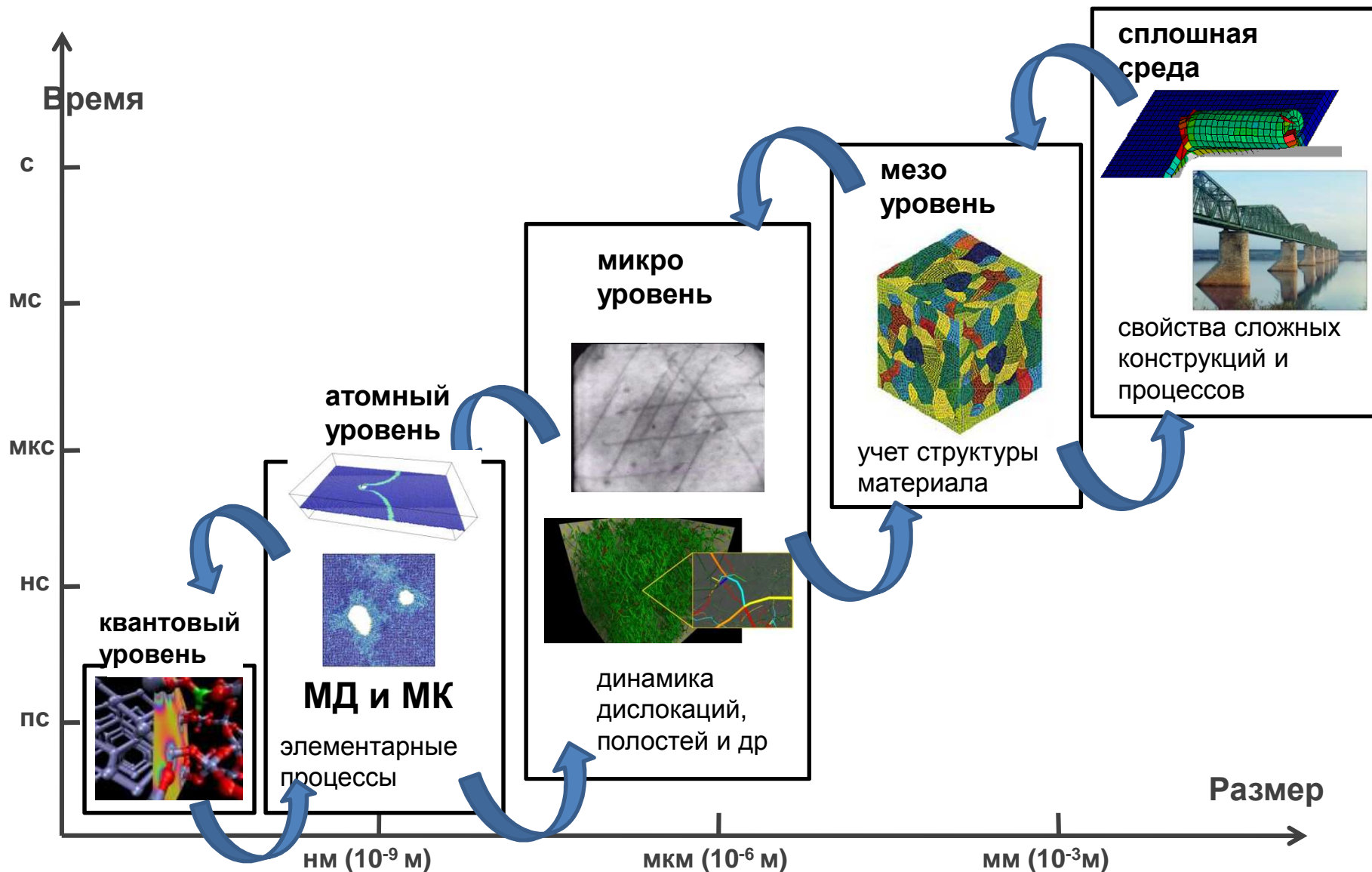
$T_e = 0.1 \text{ eV}$

$T_e = 6.0 \text{ eV}$



$$\Delta n_e(r) = n_e(r)|_{T_e=6\text{eV}} - n_e(r)|_{T_e=0.1\text{eV}}$$

Многомасштабный подход в материаловедении



Молекулярно-динамический эксперимент

Построение
объекта
исследования

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

$$\vec{v}_i\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = \vec{v}_i\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \vec{a}_i(t)\Delta t$$

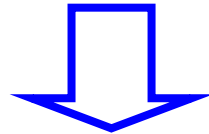
$$\vec{a}_i(t) = \frac{1}{m_i} \sum_j \vec{F}_{ij}(t)$$

$$\{\vec{r}_i(t)\}$$

$$\{\vec{v}_i(t)\}$$

$$\{\vec{F}_i(t)\}$$

**Объект исследования (модель вещества)
– это набор траекторий частиц**

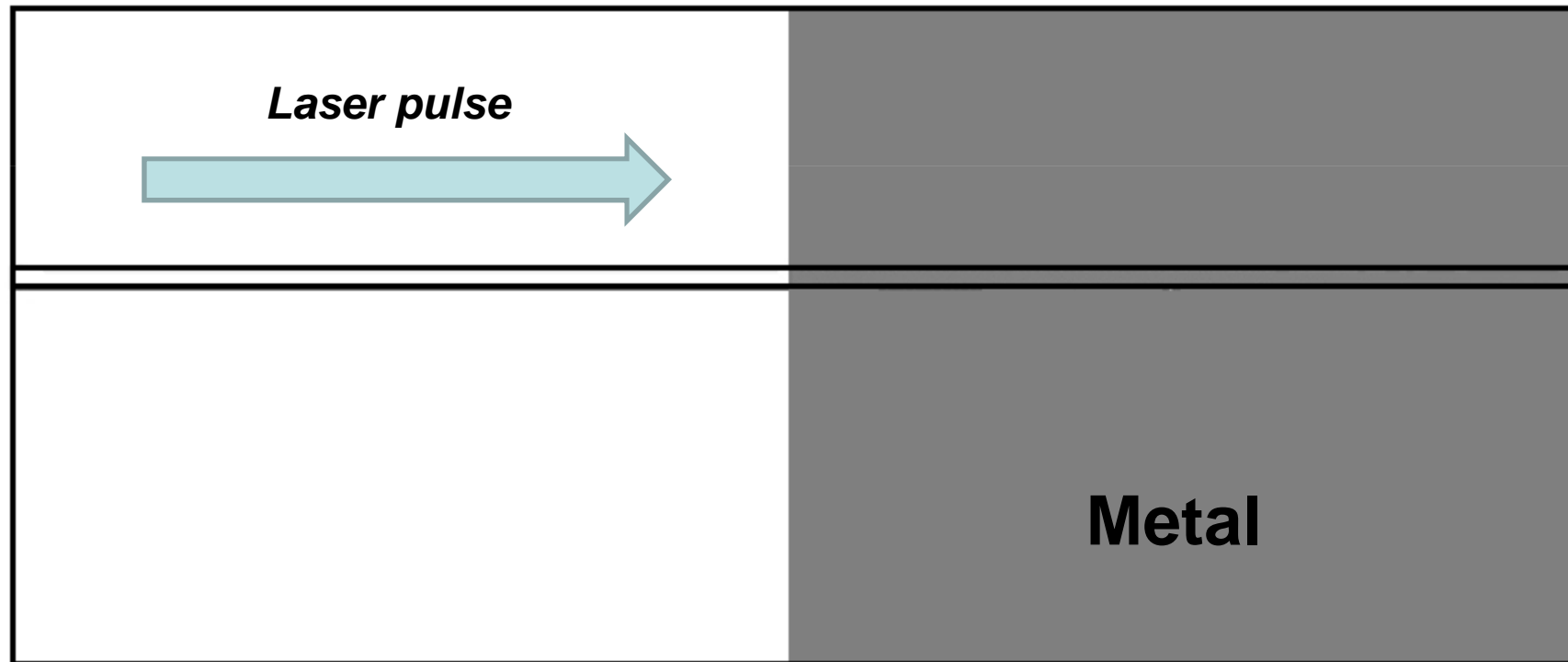


Диагностика,
набор статистики

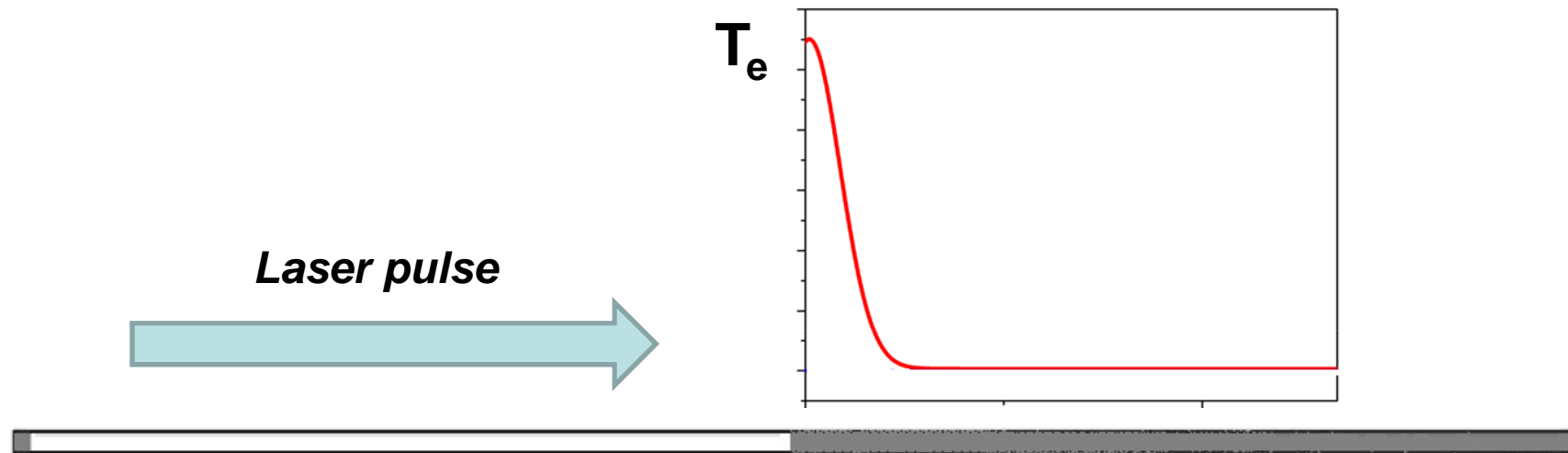
$$PV = NT - \frac{1}{3} \left\langle \sum_i \sum_{j>i} r_{ij} \frac{\partial U}{\partial r_{ij}} \right\rangle$$

Термодинамические, кинетические характеристики, строение системы (пространственное и временное разрешение)

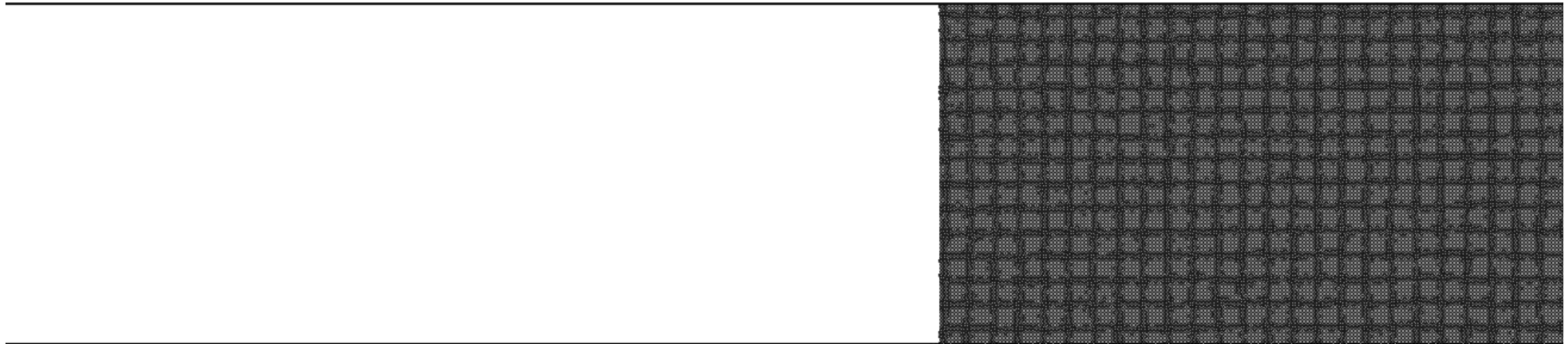
Моделирование лазерной абляции поверхности золота



Моделирование лазерной абляции поверхности золота

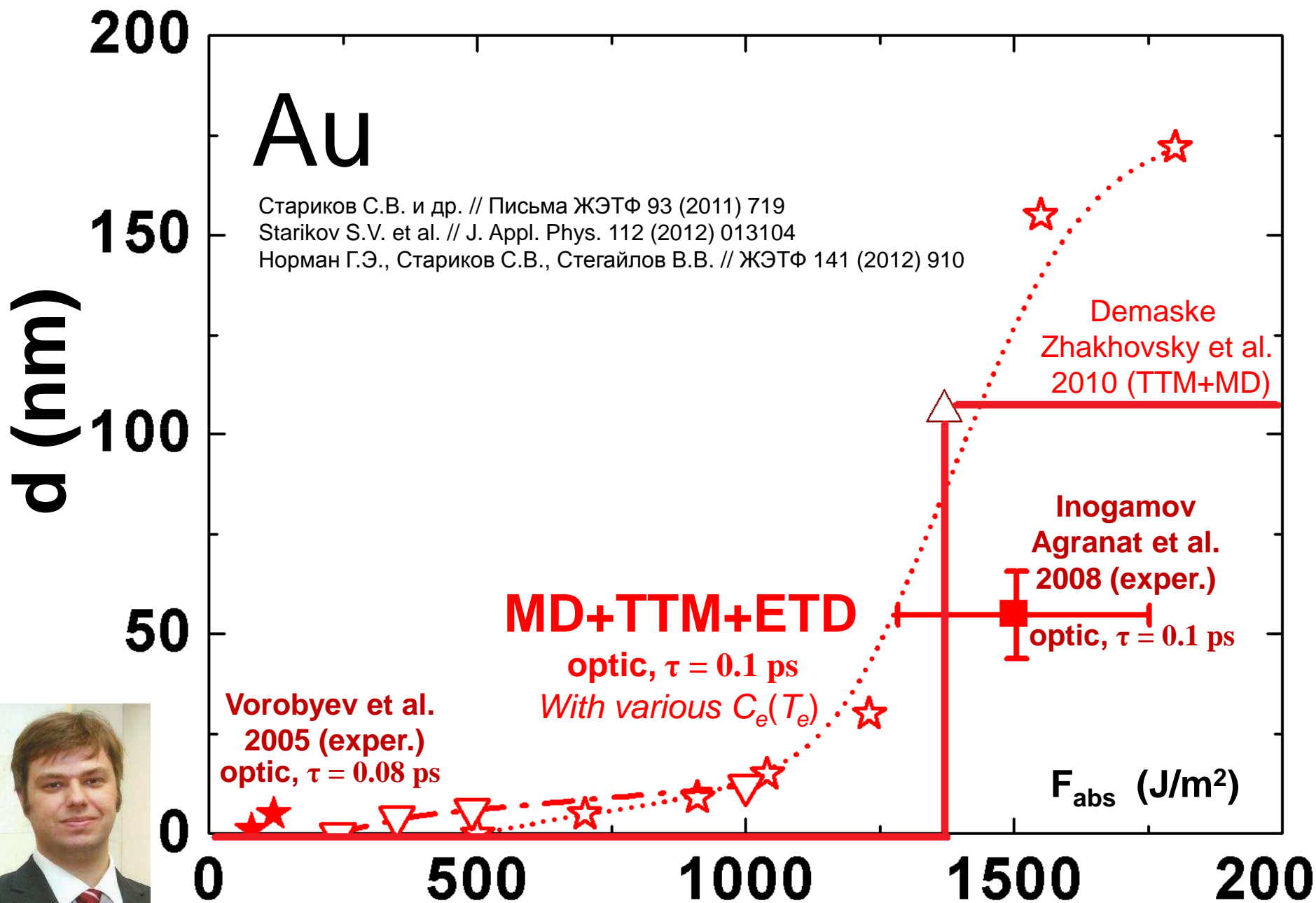


«Короткая» и «длинная» абляция



$$F = 1600 \text{ J/m}^2$$

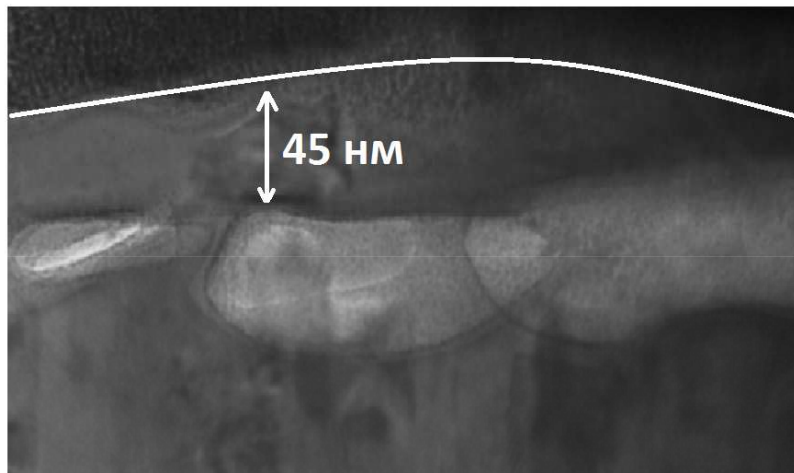
Глубина кратера в зависимости от погл. флюенса





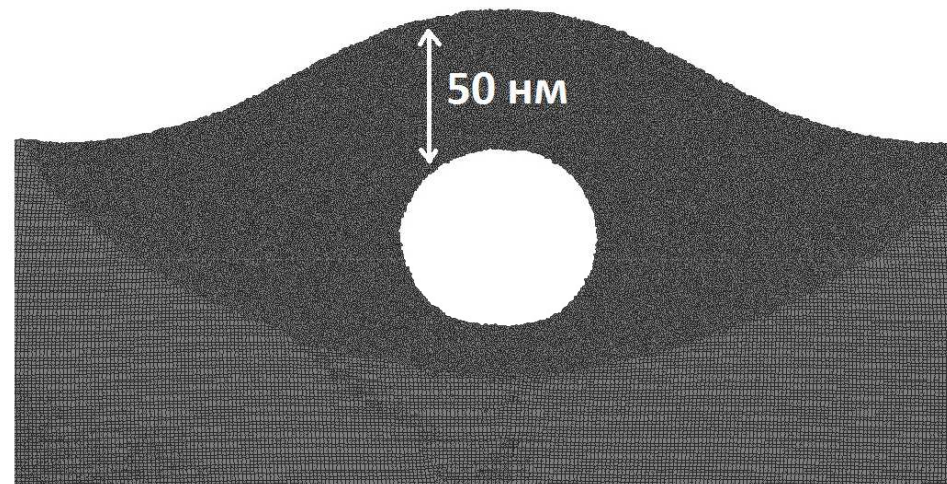
Атомистическое 3D-моделирование модификации поверхности лазерным импульсом

нанополости в алюминии



Изображение получено при использовании ТЕМ

[Ашитков, Иногамов, Жаховский, Эмиров, Агранат, Олейник, Анисимов, Фортов // Письма в ЖЭТФ (2012)]



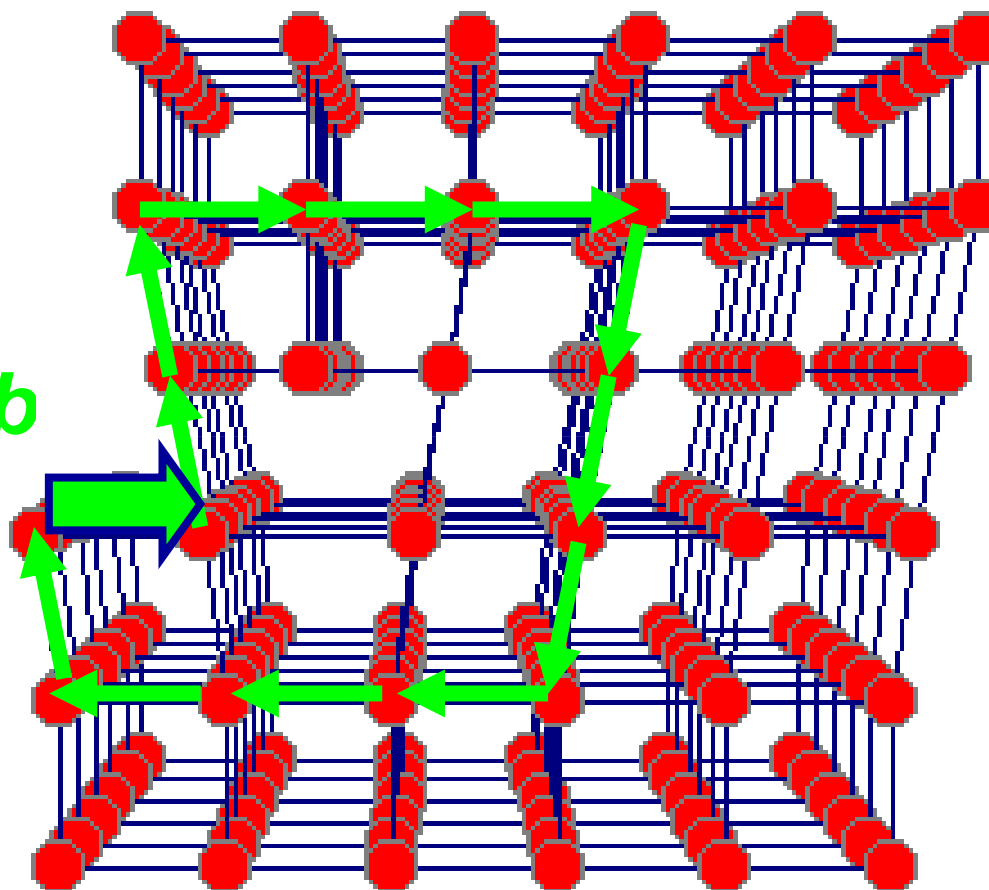
МД модель

Starikov S.V. et al. // Applied Physics B (2014)

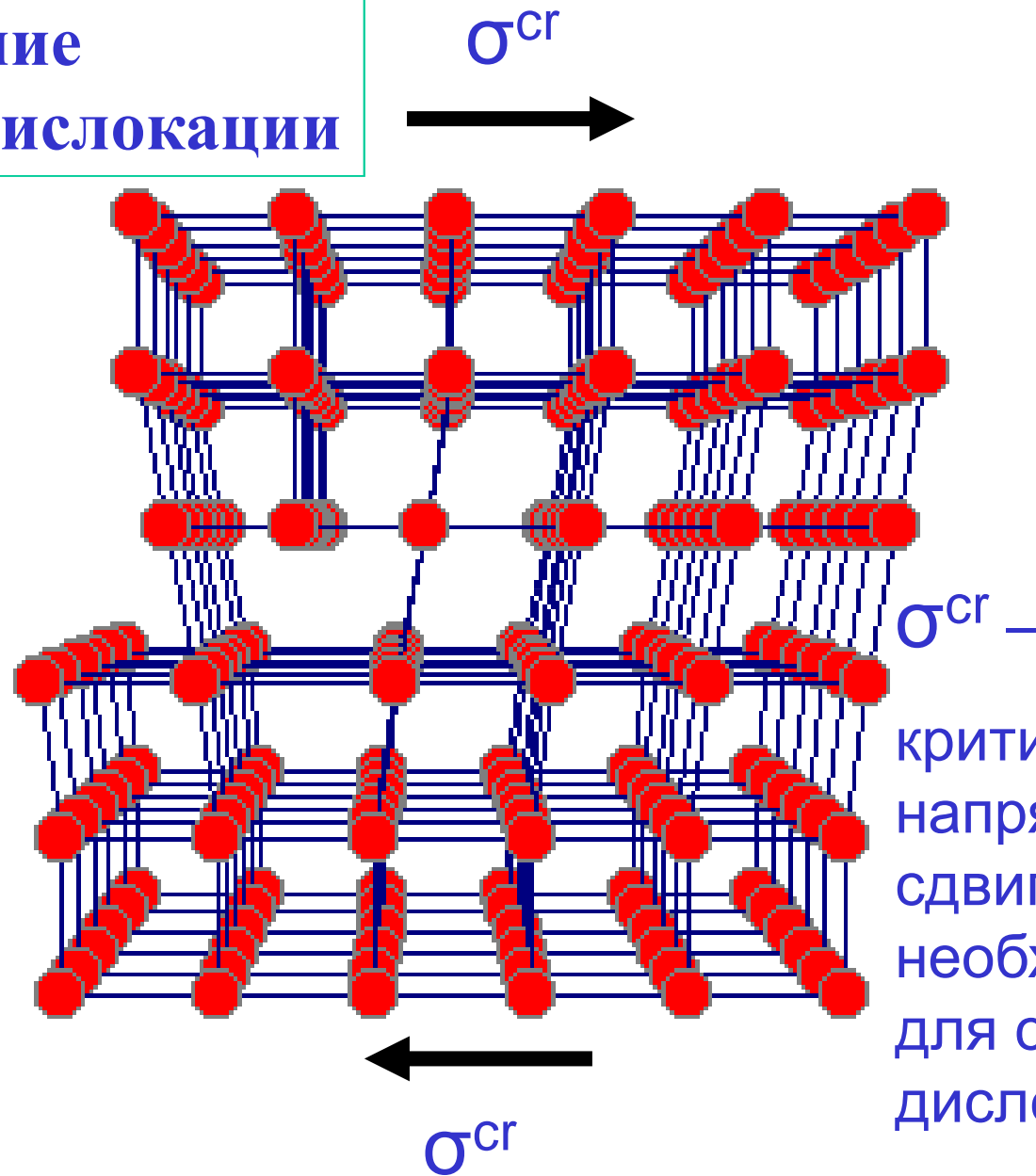
**Пластичность.
Разрушение.
Нуклеация**

Краевая дислокация

вектор
Бюргерса b



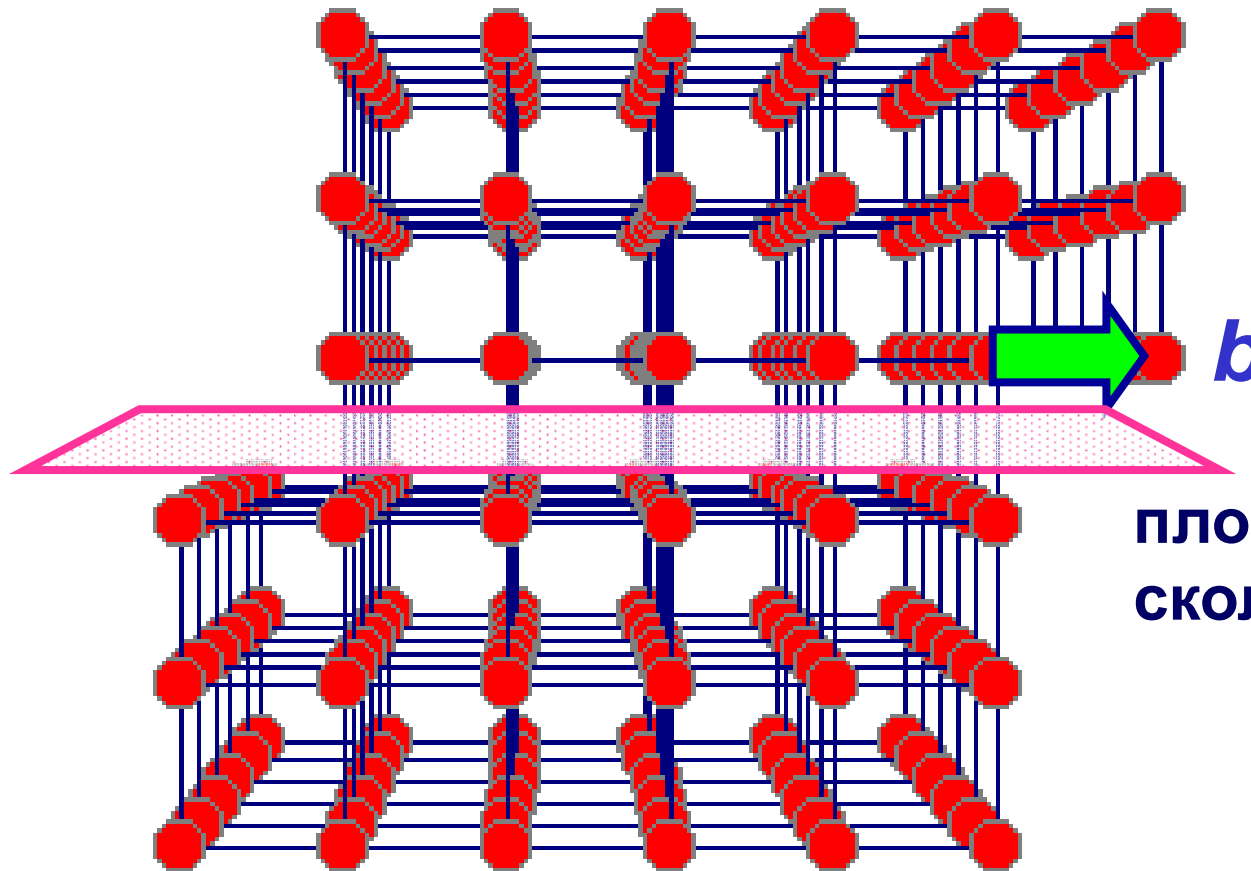
Скользяние краевой дислокации



σ^{cr} —
критическое
напряжение
сдвига,
необходимое
для скольжения
дислокации

**Скользяние
краевой дислокации**

σ^{cr}



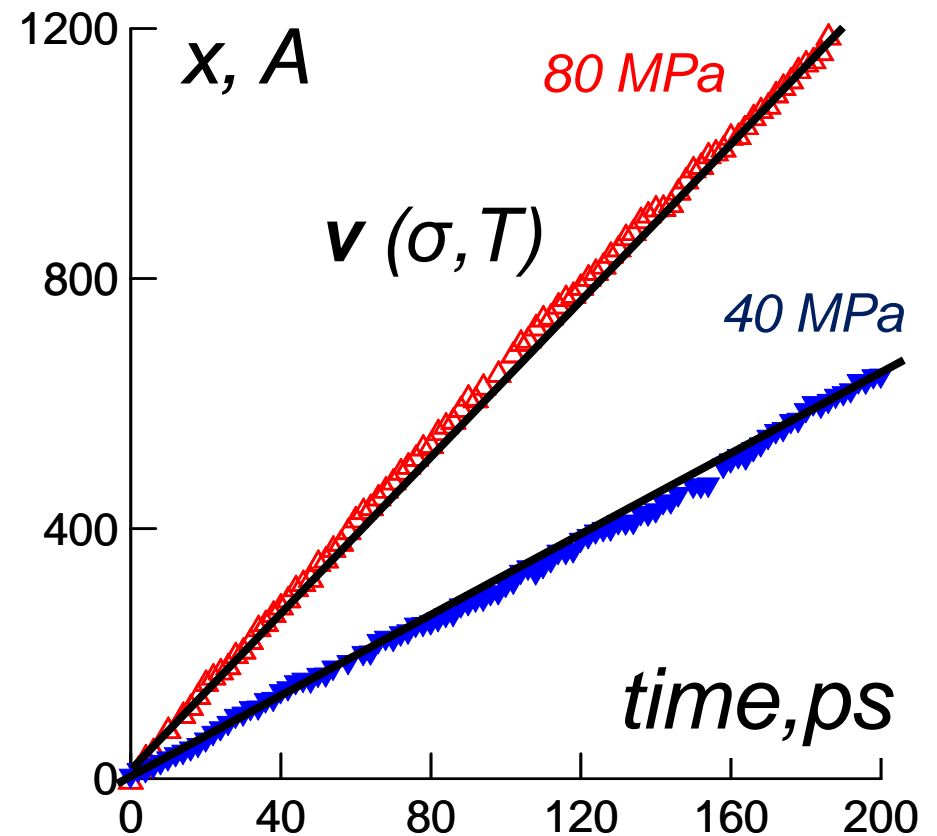
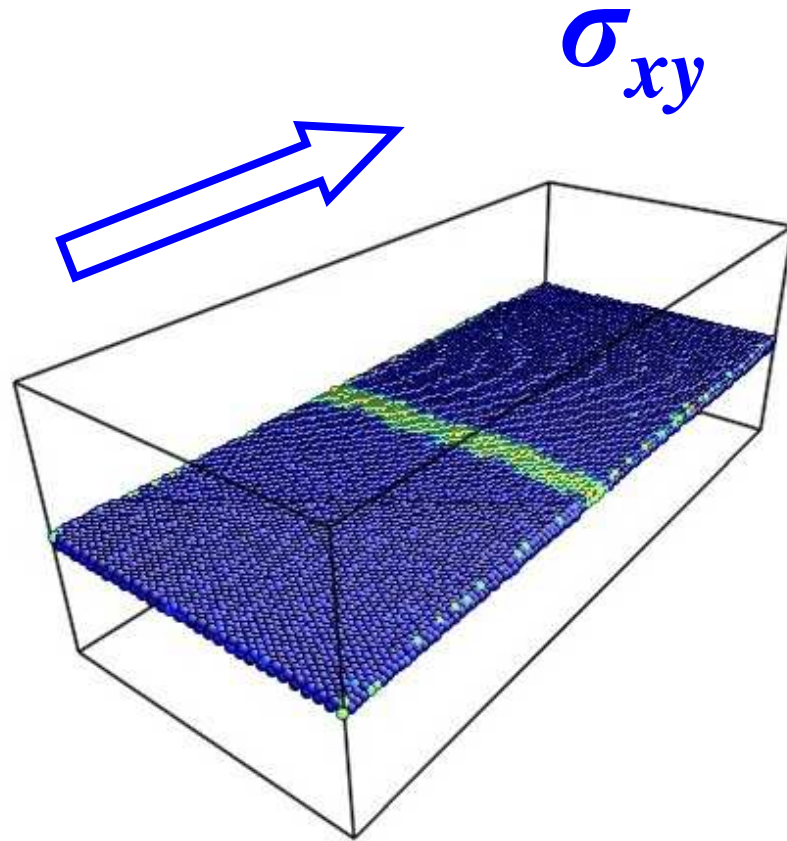
b

**ПЛОСКОСТЬ
СКОЛЬЖЕНИЯ**

σ^{cr}

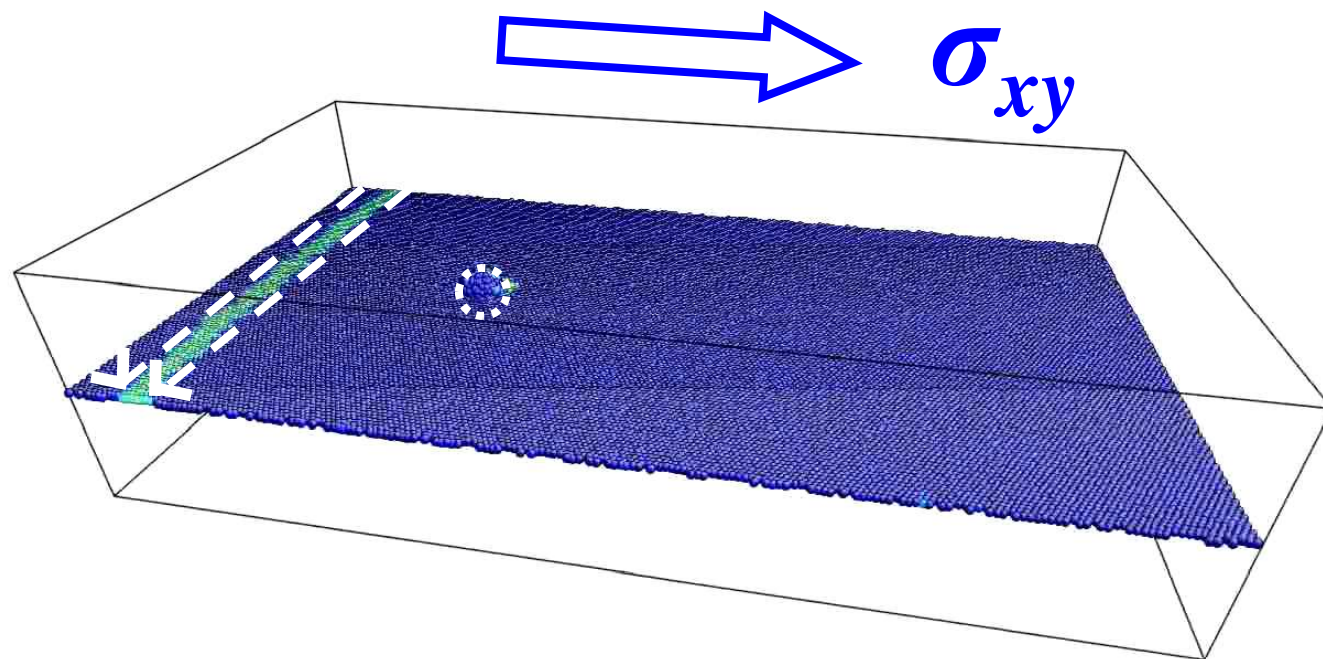


Движение дислокации под действием сдвиговых напряжений



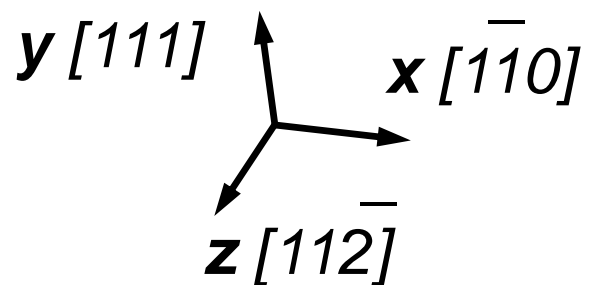
$$\sigma b = B(T) v_{disl}$$

Динамика дислокаций: взаимодействие с препятствиями



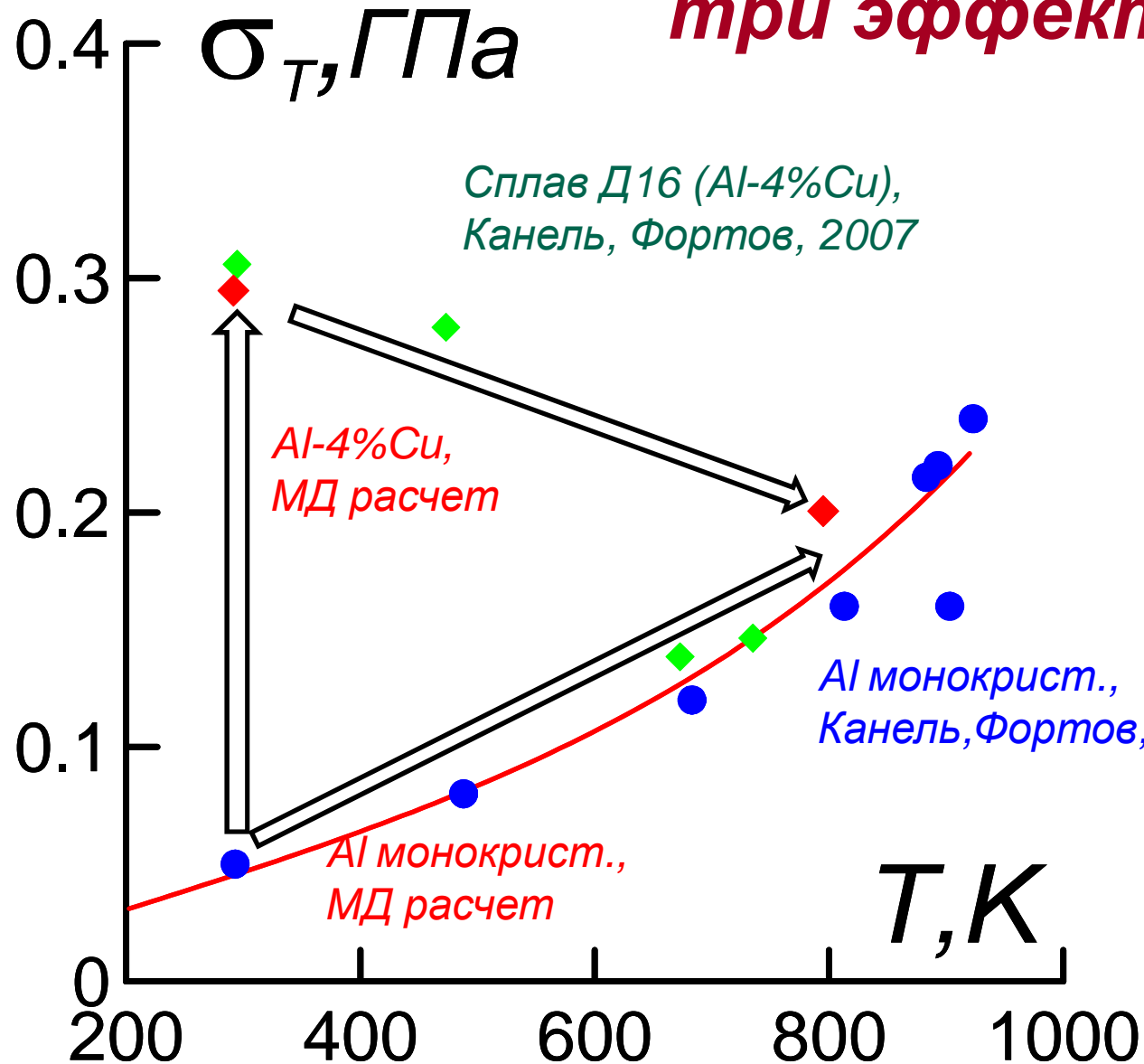
Дефекты
кристалла –
препятствия
движению
дислокаций

Кластер Cu в Al
T=700 K,
20 x 4ps = 80ps
400Å x 80Å x 120Å



Оценка динамического предела текучести

три эффекта



$$\varepsilon = 10^6 \text{ c}^{-1}$$

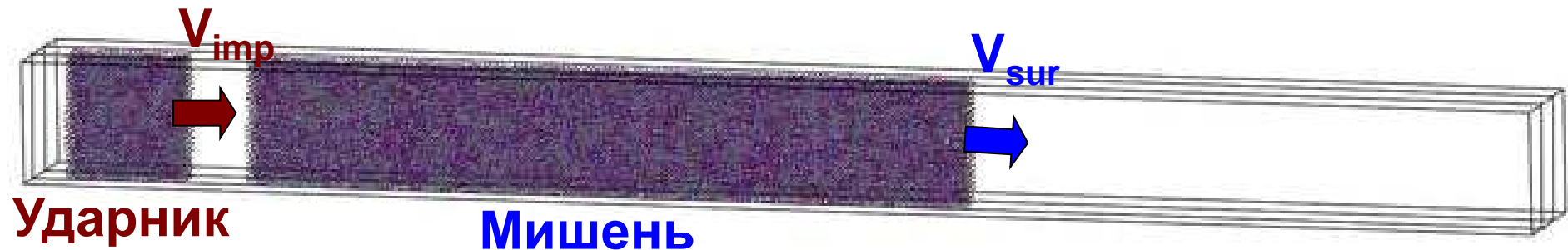
Al - 4% Cu

$r = 15 \text{ \AA}$

$L = 300 \text{ \AA}$



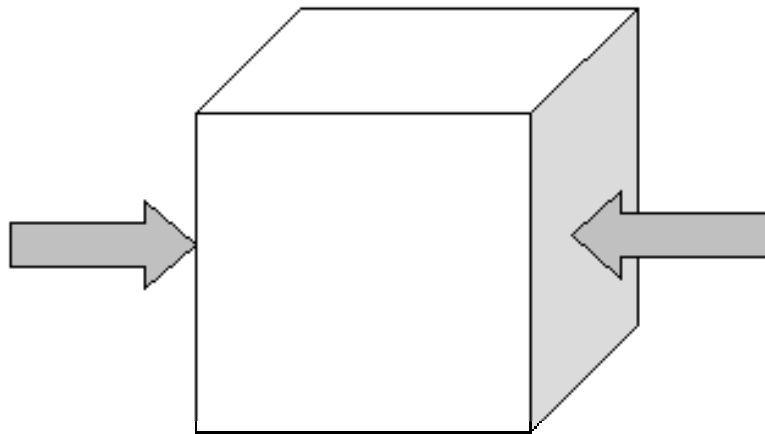
Атомистическая модель процесса откола в условиях высокоскоростного удара



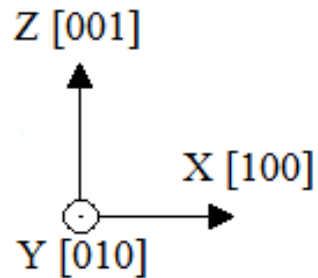
Параметры модели:

1. $T = 300 \text{ K}$
2. Число атомов $N = 112000$
3. Соотношение массы ударника и мишени $1/6$
4. Концентрация дефектов 0.05
5. Скорость ударника $V_{imp} = 200 \text{ м/с}$

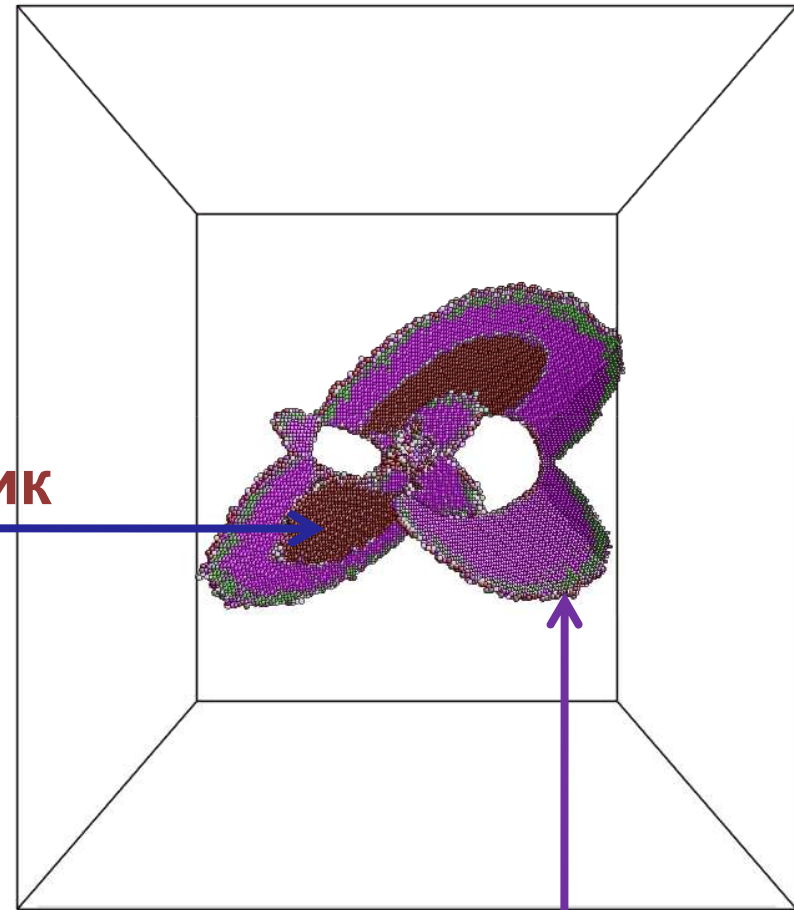
Создание остаточной пластической деформации с помощью одноосного сжатия



T=100 K
40x40x40 nm
N=4 millions atoms
 $P_{xx}=8$ GPa

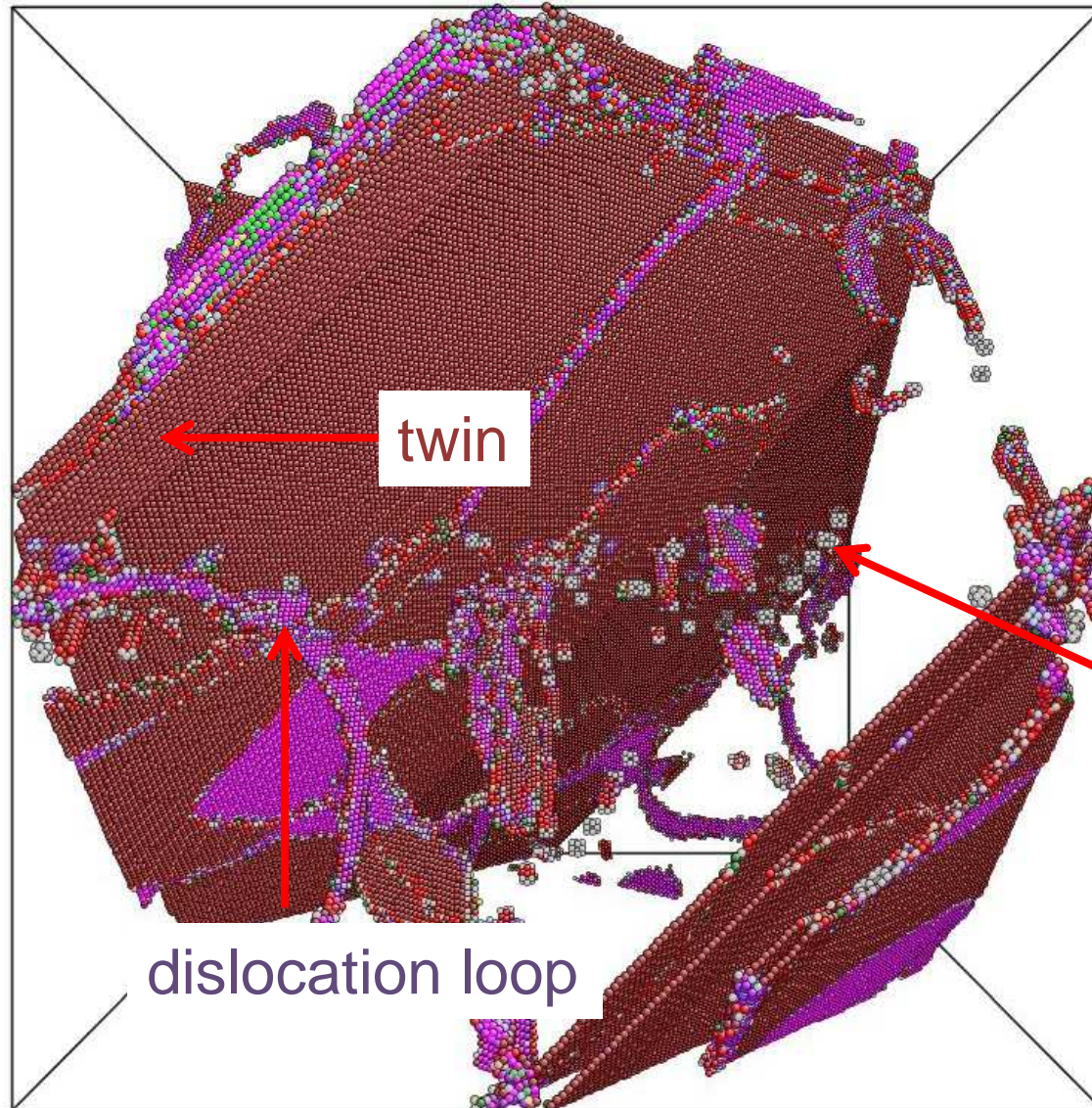


Двойник



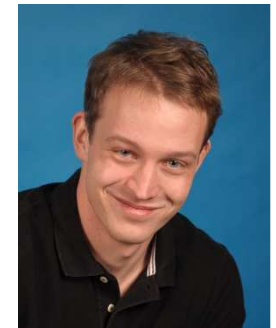
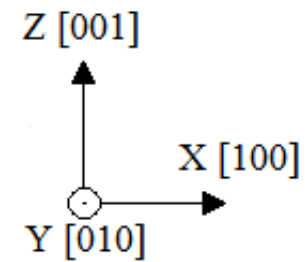
Петля дислокации

Релаксация к ненапряженному состоянию (остаточные дефекты)

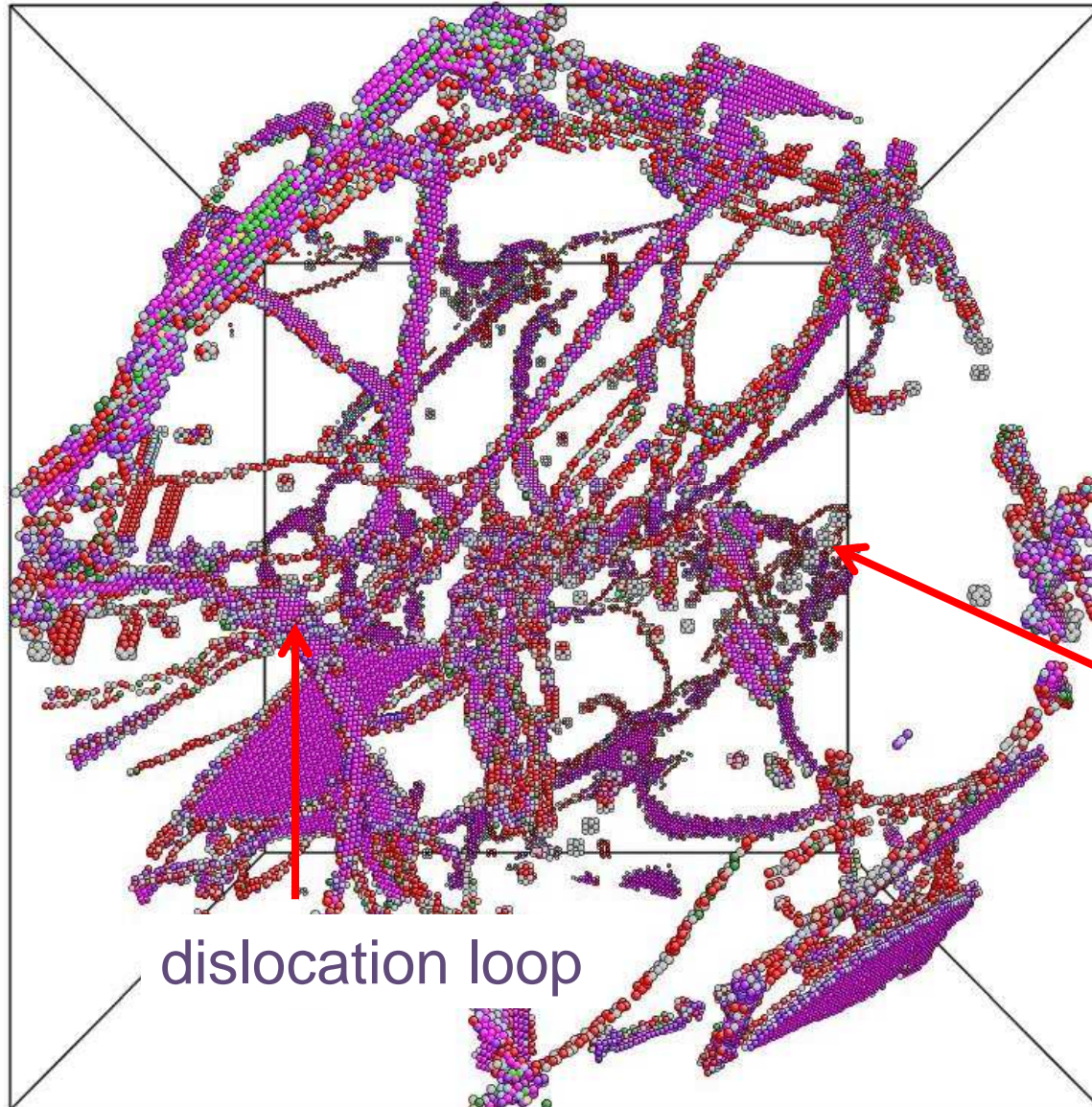


$T=100$ K
 $40 \times 40 \times 40$ nm
 $N=4$ millions atoms
 $P_{xx}=0$ GPa

vacancies



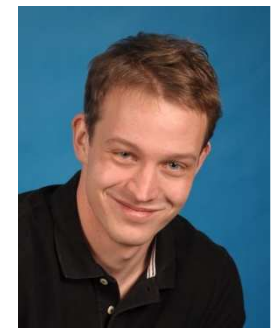
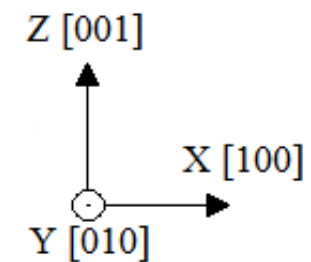
Релаксация к ненапряженному состоянию (остаточные дефекты, без двойников)



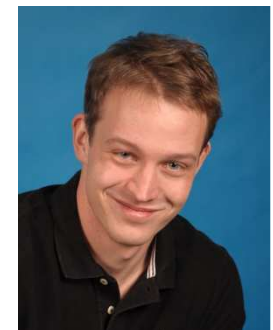
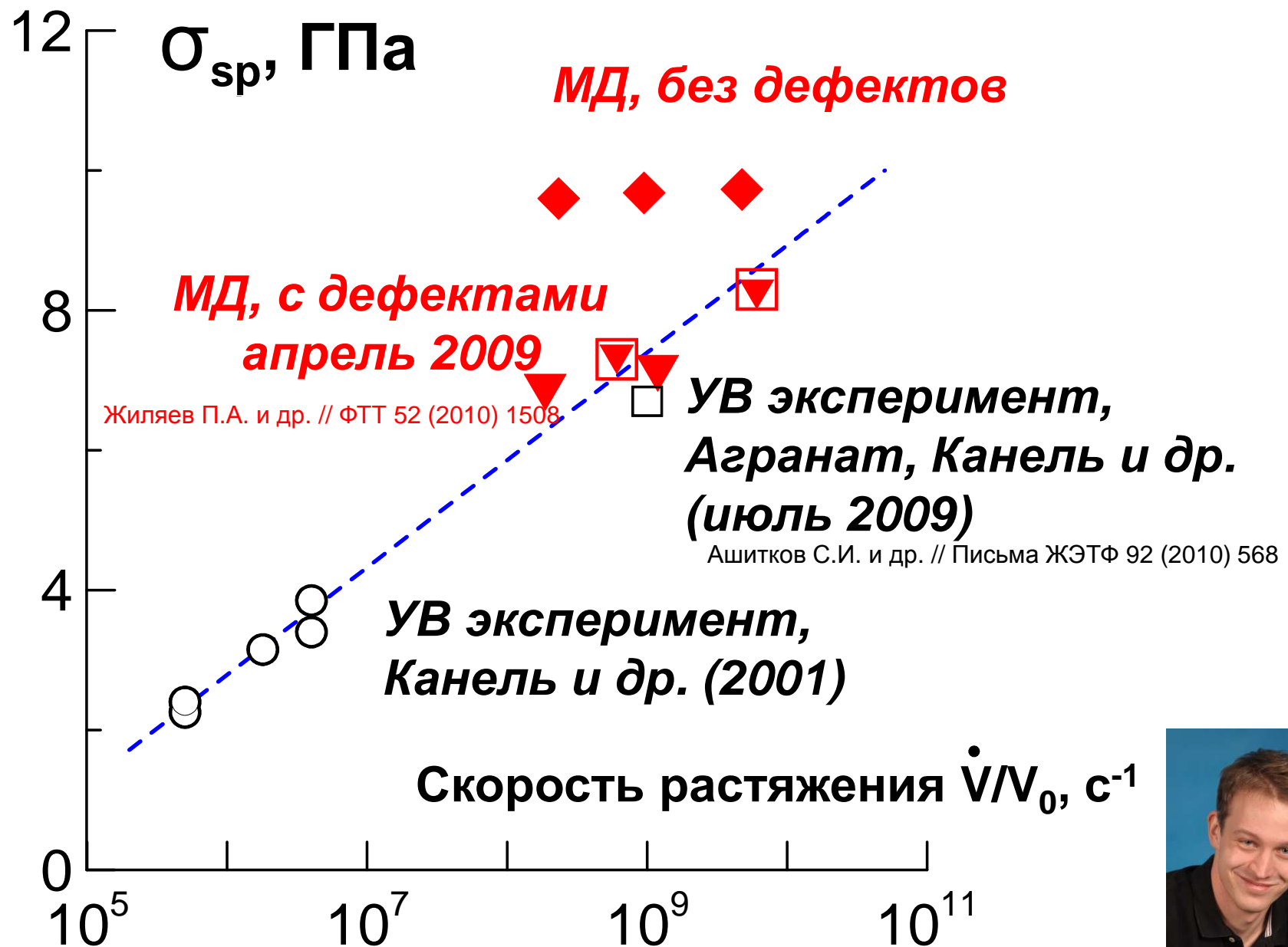
$T=100$ K
 $40 \times 40 \times 40$ nm
 $N=4$ millions atoms
 $P_{xx}=0$ GPa

vacancies

dislocation loop



Оценка откольной прочности: Al, $T \approx 300$ K



Подход «нуклеация и рост»

Скорость зарождения полостей

$$\dot{n}(t) = J [a(t)] V_0$$

Объем полости

$$v_v(t) = \frac{4\pi}{3} \left(\int_0^t \mu [a(\tau)] d\tau \right)^3$$

Полный объем полостей

$$V_v = \int_0^t v_v(t - \tau) \dot{n}(\tau) d\tau$$

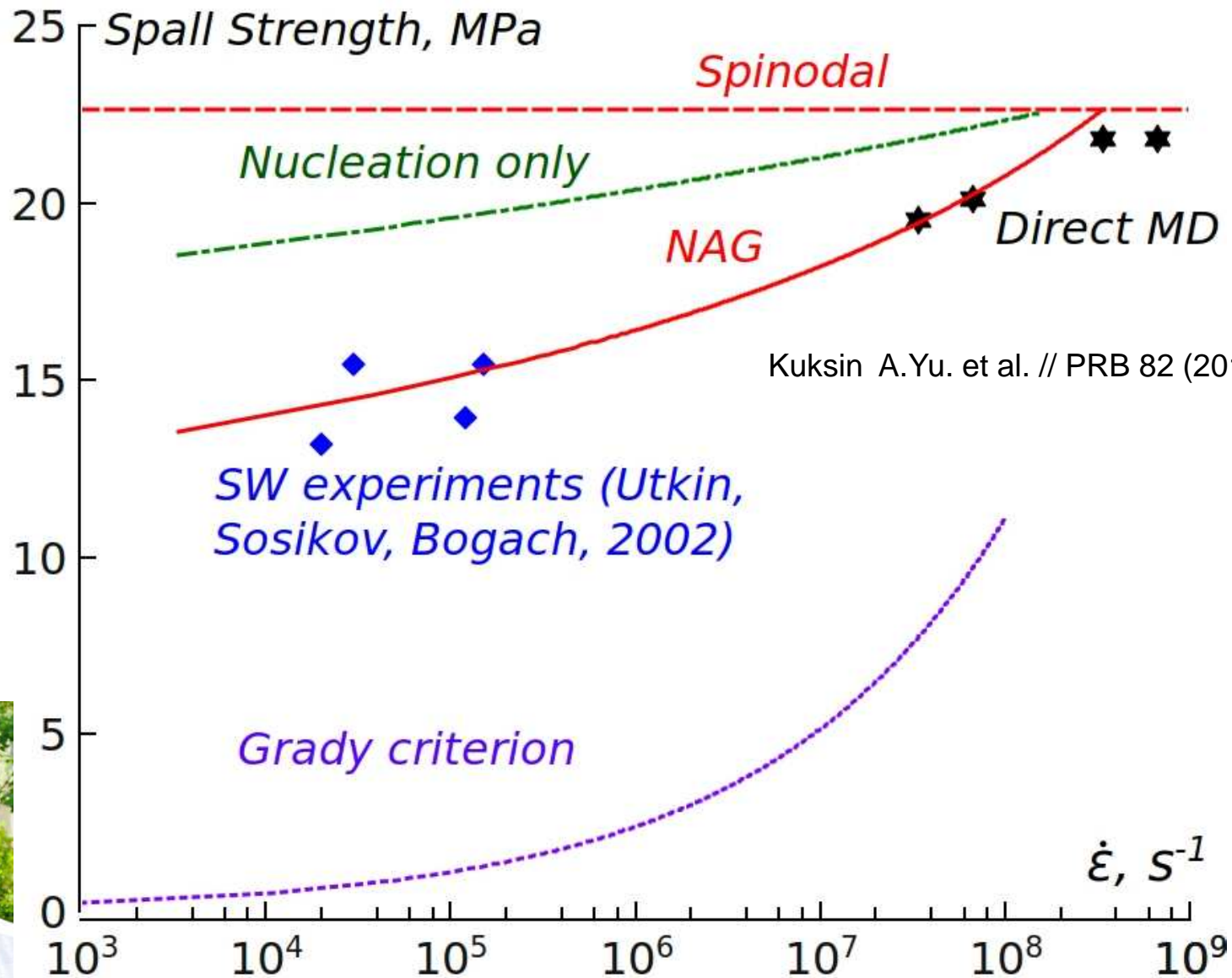
$$\frac{V_v}{V_0} = \int_0^t \frac{4\pi}{3} \left(\int_{\tau}^t \mu [a(\xi)] d\xi \right)^3 J [a(\tau)] d\tau$$



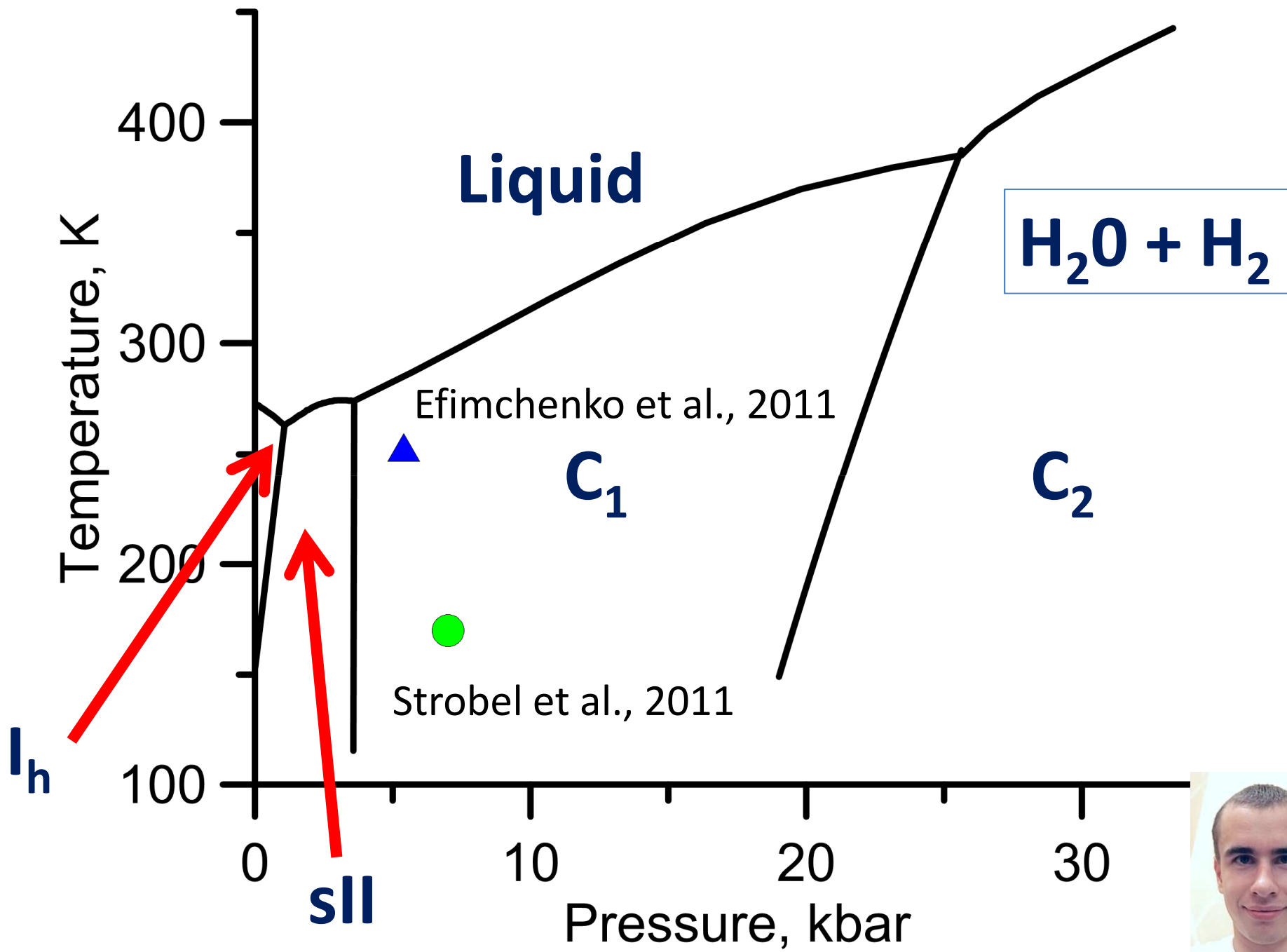
Критерий откола

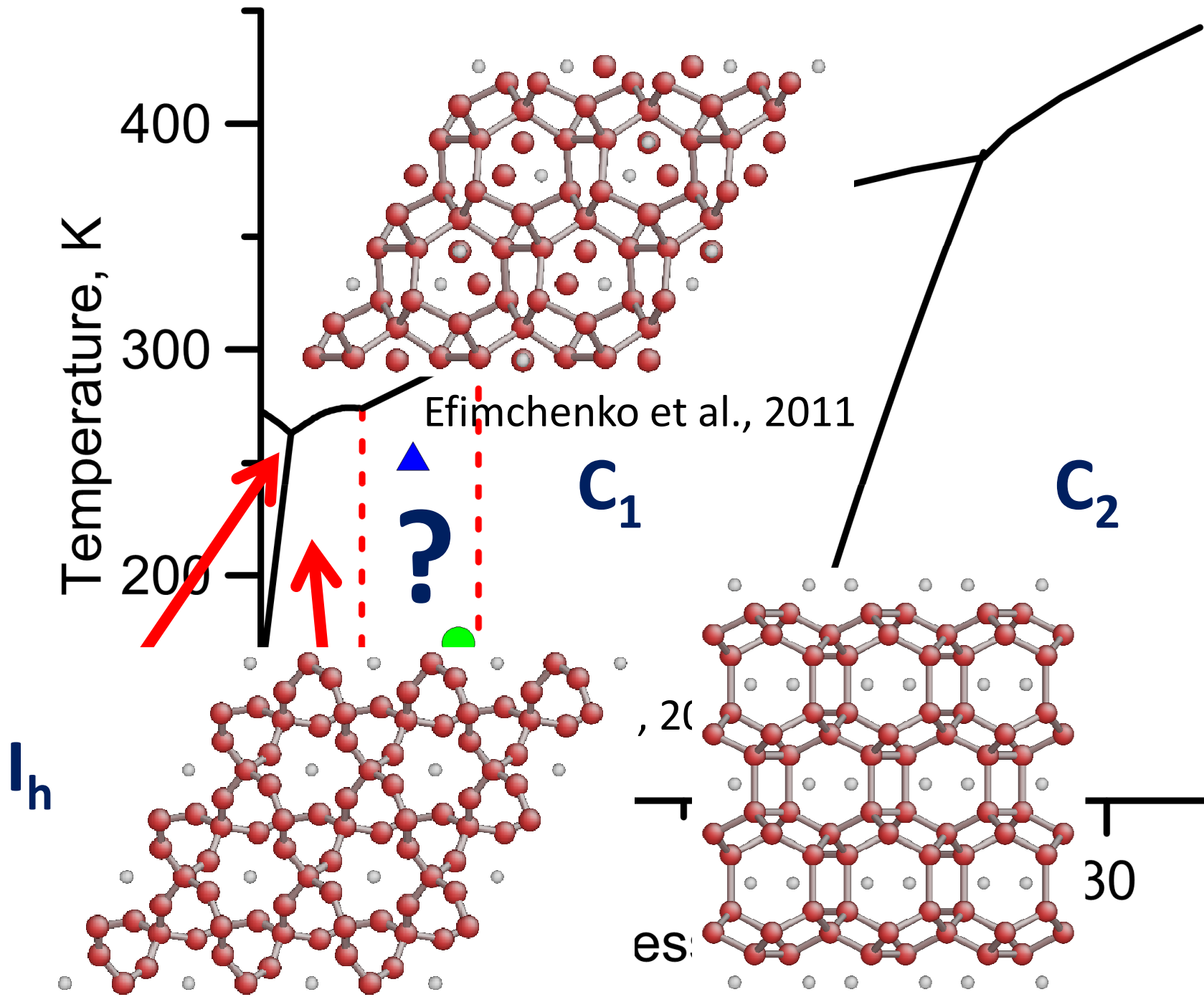
$$V_v = V_0 \longrightarrow t_{spall}$$

Откольная прочность жидкого гексана $T \approx 300\text{ K}$

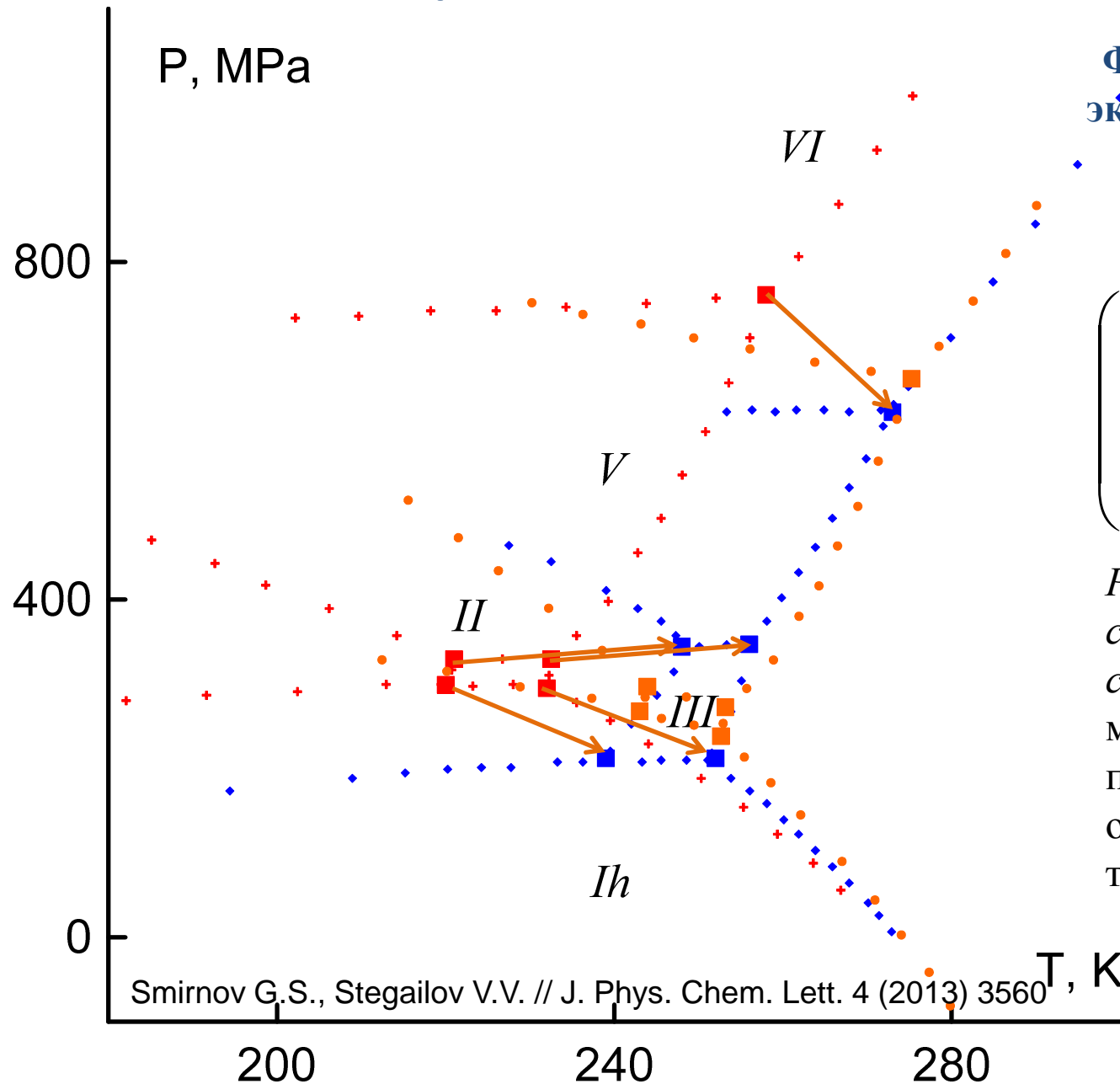


Фазовые диаграммы





Оценка систематических погрешностей описания фазовых диаграмм на основе эмпирических моделей межатомного взаимодействия

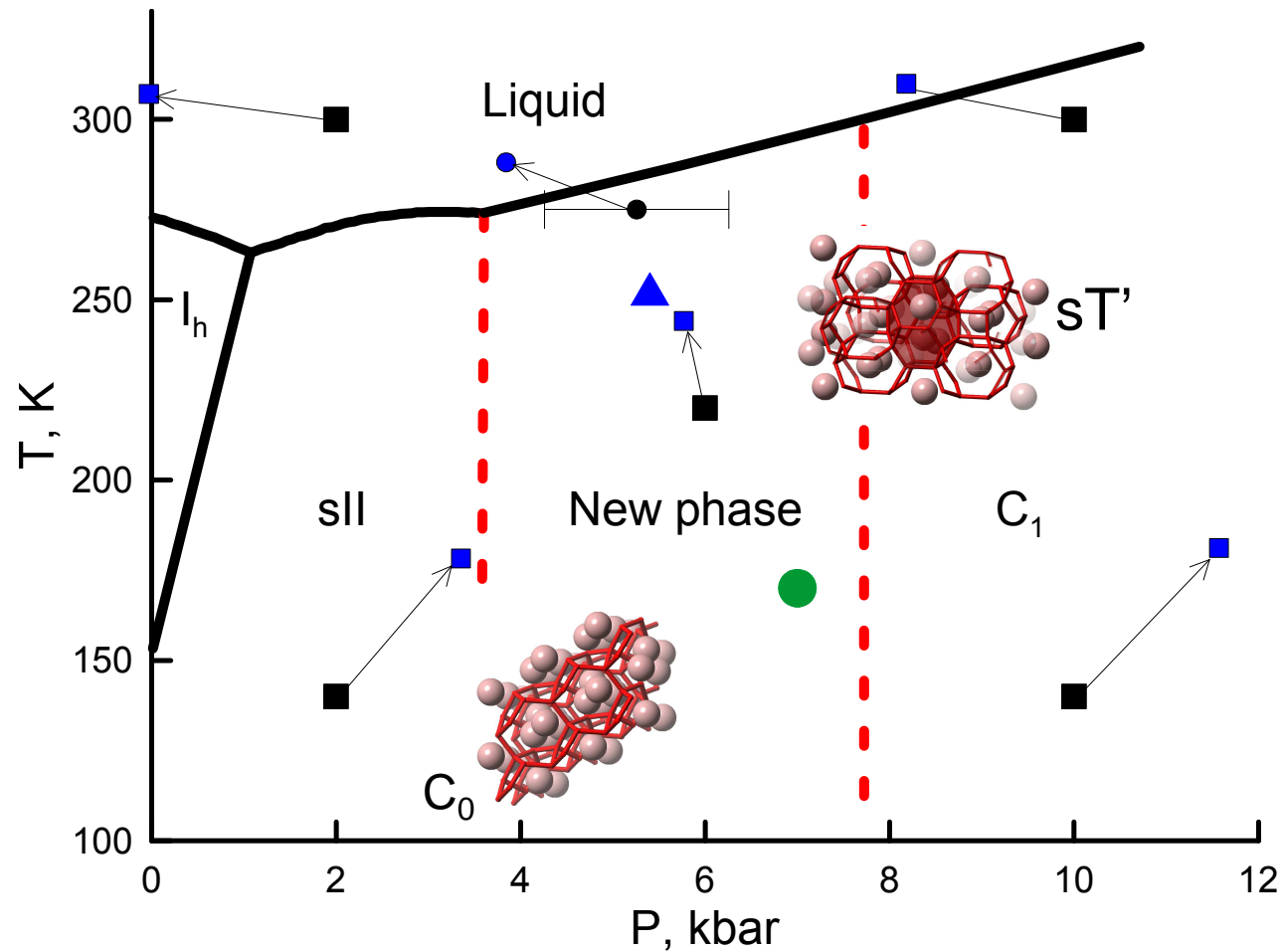


Фазовая диаграмма льдов:
эксперимент и TIP4P модель

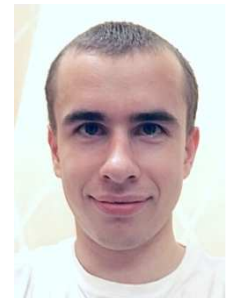
$$\begin{pmatrix} P^{TIP4P\backslash Ice} \\ T^{TIP4P\backslash Ice} \\ 1 \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} P^{Exp} \\ T^{Exp} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Расширение закона
соответственных
состояний:
матрица аффинного
преобразования A
определяется по 5 тройным
точкам

Оценка систематических погрешностей описания фазовых диаграмм на основе эмпирических моделей межатомного взаимодействия: применение к случаю новой фазы гидрата водорода

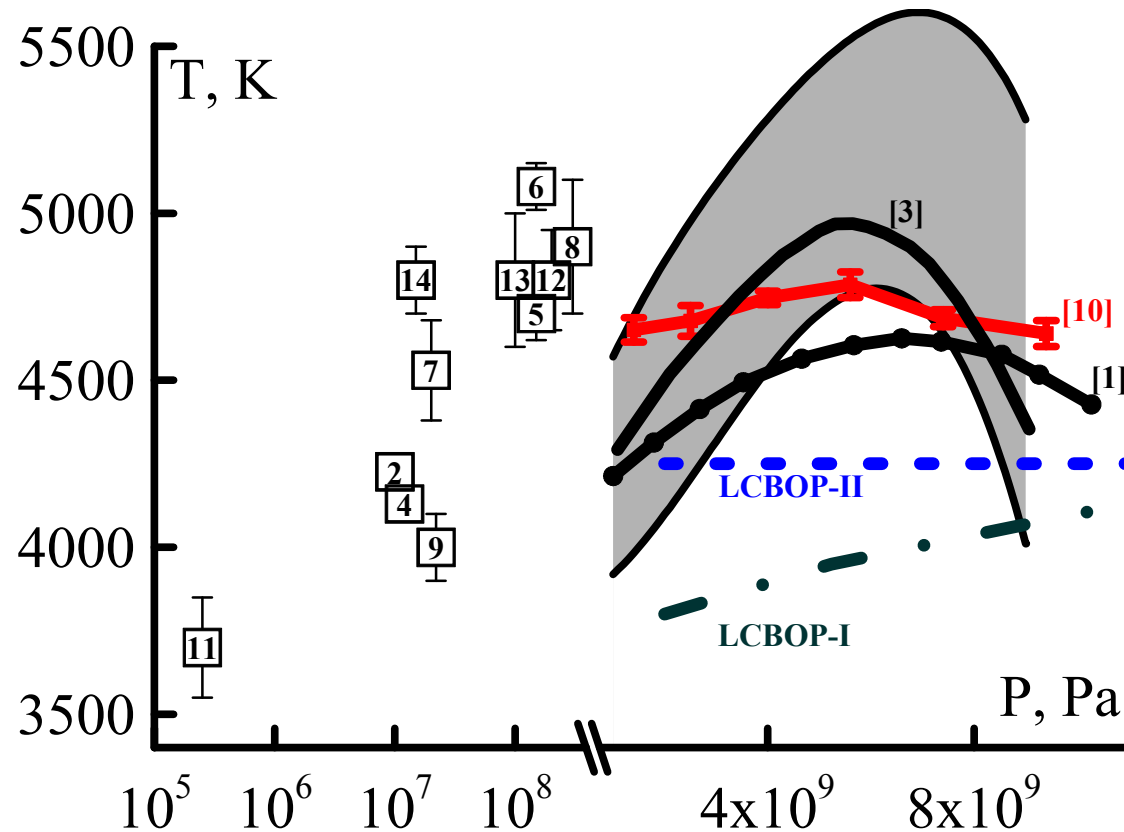


Smirnov G.S., Stegailov V.V. // J. Phys. Chem. Lett. 4 (2013) 3560





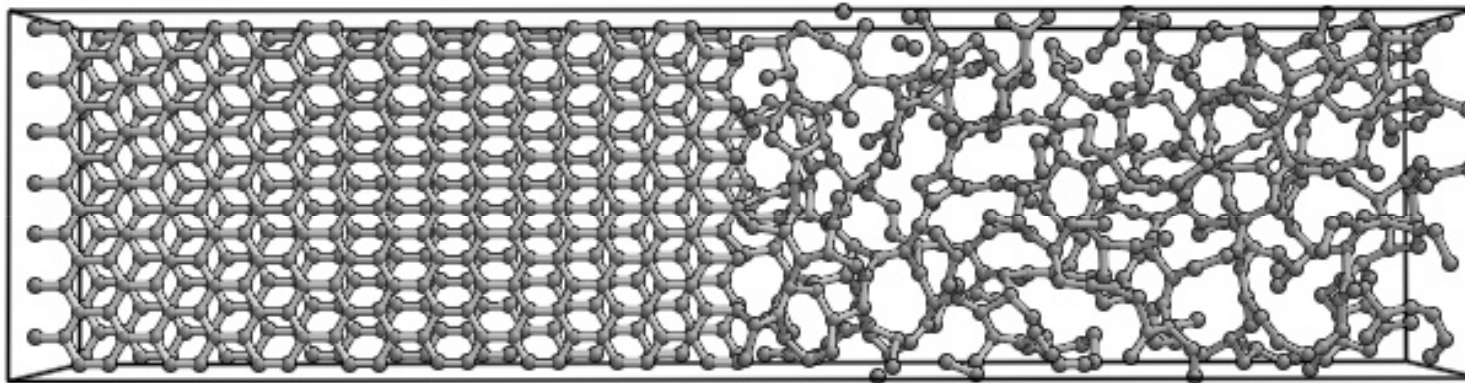
Плавление графита



- [1] F. Bundy, J. Chem. Phys. 38, 618 (1963).
- [2] G. J. Schoessow, Phys. Rev. Lett. 21, 738 (1968).
- [3] L. Fateeva, NS Vereshchagin, JETP Lett. 13, 110 (1971).
- [4] N. Gokcen, E. Chang, T. Poston, and D. Spencer, High Temp. Sci. 8, 81 (1976).
- [5] M. Sheindlin and V. Senchenko, Sov Phys Dokl 298, 1383 (1988).
- [6] A. Baitin, A. Lebedev, S. Romanenko, V. Senchenko, and M. Sheindlin, High Temp-High Press 22, 157 (1990).
- [7] A. Cezairliyan and A. Miiller, Int. J. Thermophys. 11, 643 (1990).
- [8] G. Pottlacher, R. Hixson, S. Melnitzky, E. Kaschnitz, M. Winkler, and H. Jager, Thermochim. Acta 218, 183 (1993).
- [9] E. I. Asinovskij, A. Kirillin, and A. Kostanovskij, High. Temp. 35, 716 (1997).
- [10] M. Togaya, Phys. Rev. Lett. 79, 2474 (1997).
- [11] E. Asinovskii, A. Kirillin, A. Kostanovskii, and V. Fortov, High. Temp. 36, 716 (1998).
- [12] M. Musella, C. Ronchi, M. Brykin, and M. Sheindlin, J. Appl. Phys. 84, 2530 (1998).
- [13] A. I. Savvatimskii, Physics-Uspexhi 46, 1295 (2003).
- [14] A. Y. Basharin, M. V. Brykin, M. Y. Marin, I. S. Pakhomov, and S. F. Sitnikov, High. Temp. 42, 60 (2004).



Двухфазная модель движения фронта плавления



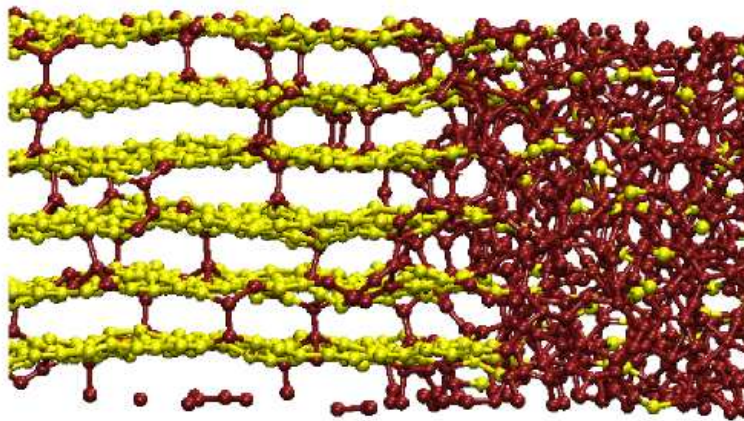
Орехов Н.Д., Стегайлов В.В. Молекулярно-Динамическое Моделирование Плавления Графита // **Теплофизика Высоких Температур**. 2014. Т. 52. N. 2. С. 220-228.

Orekhov N.D., Stegailov V.V. Molecular dynamics simulation of graphite melting // **High Temperature**. 2014. Vol. 52. No. 2. P. 199-205.

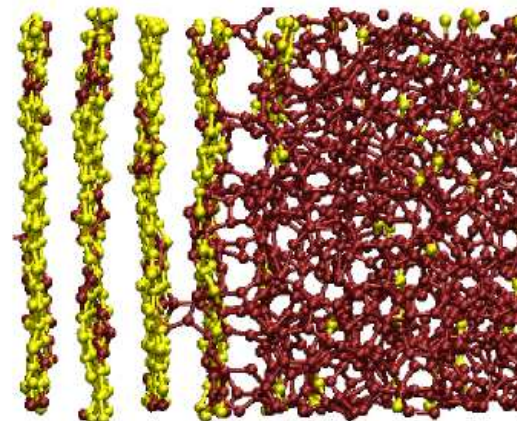


Плавление графита

Движение фронта плавления

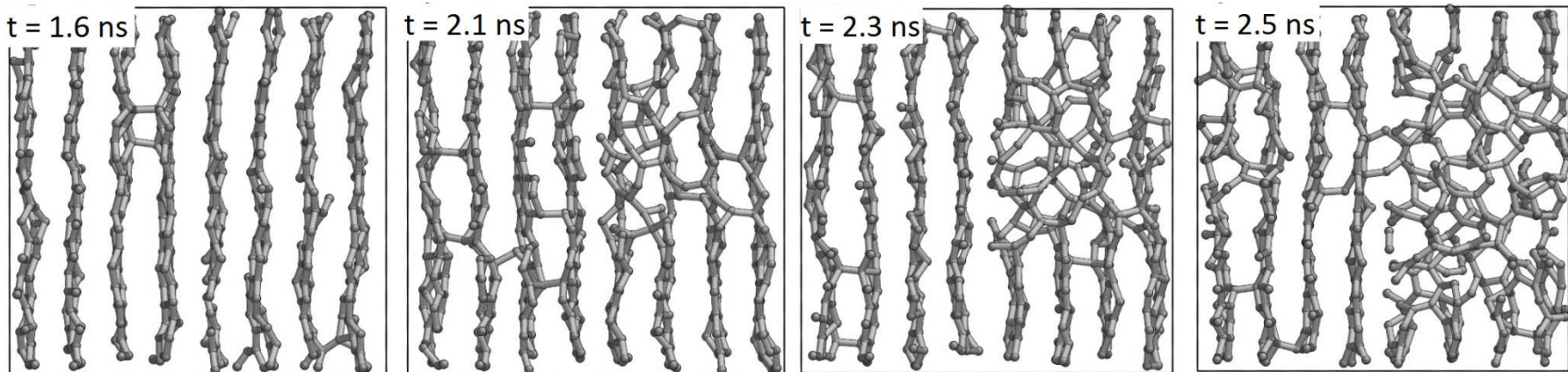


A



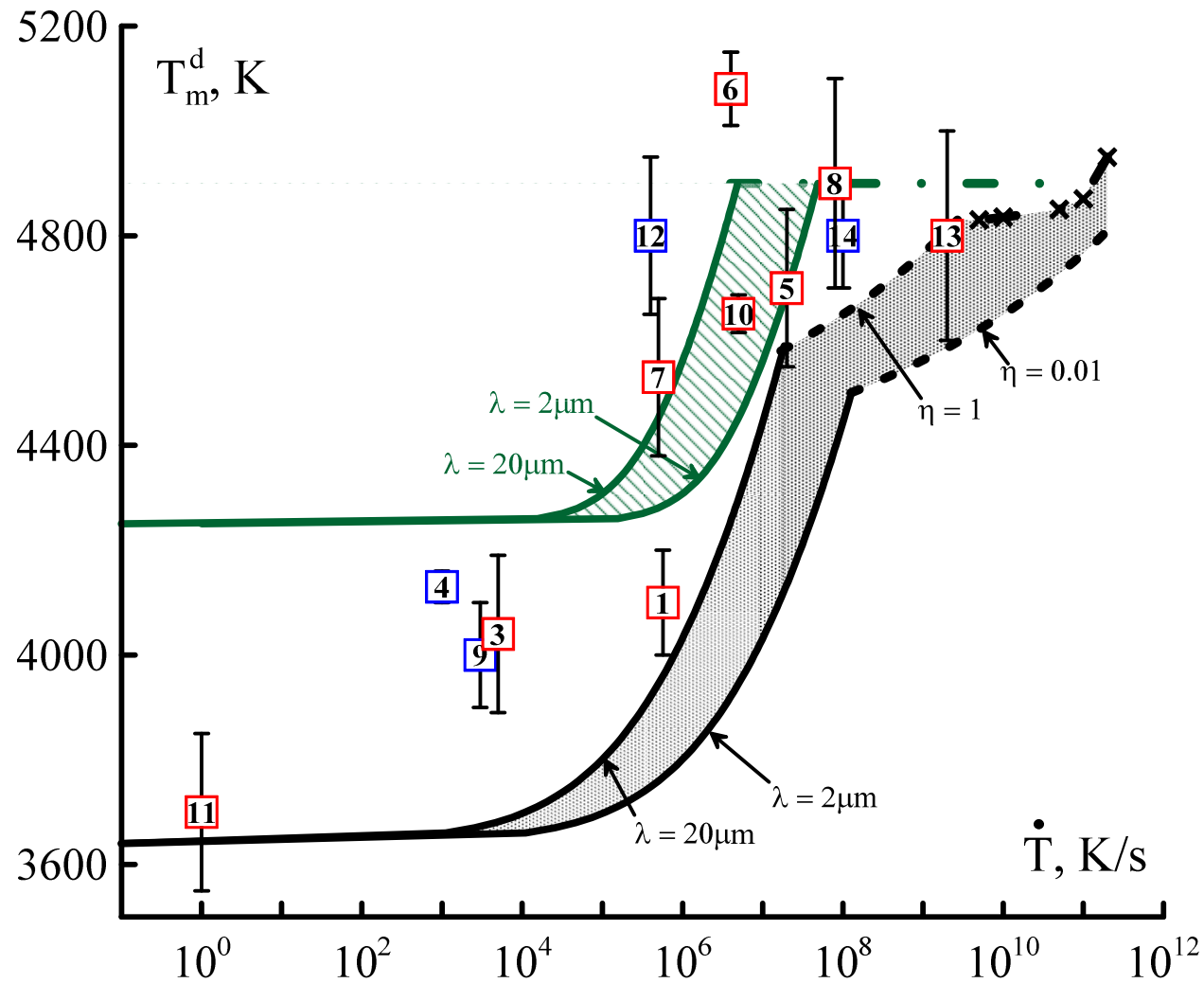
B

Гомогенная нуклеация





Экспериментально детектируемая температура плавления графита в зависимости от скорости нагрева

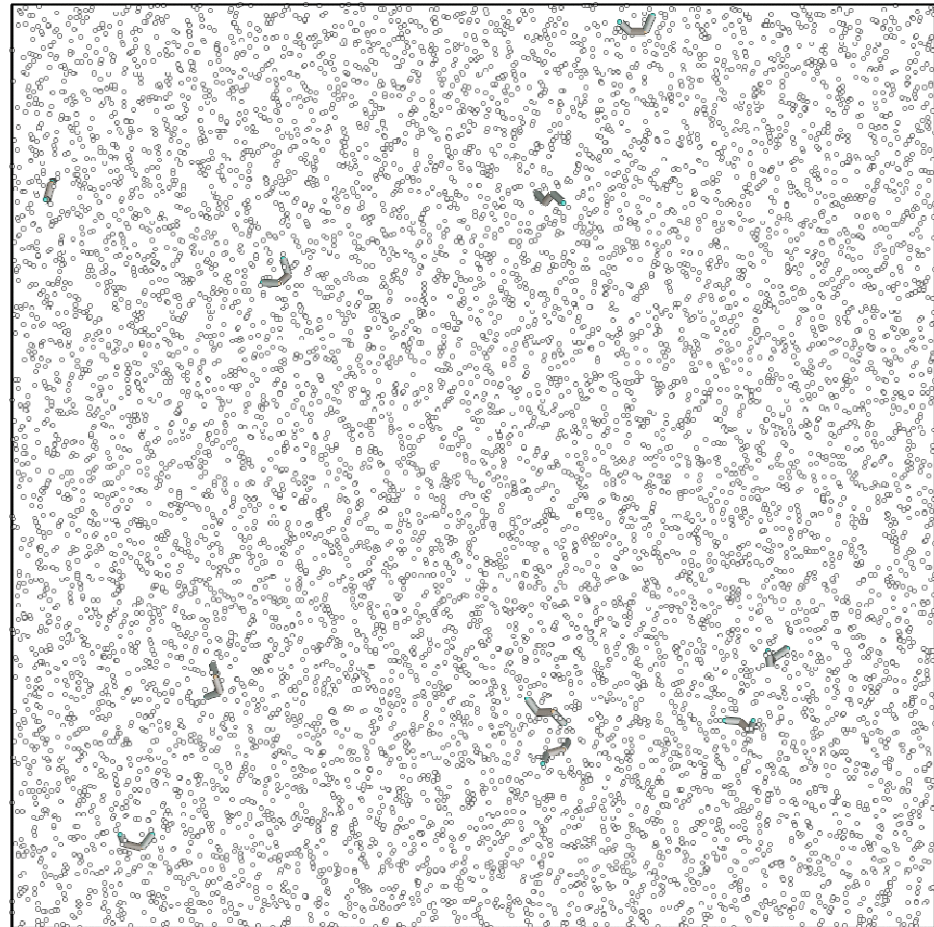
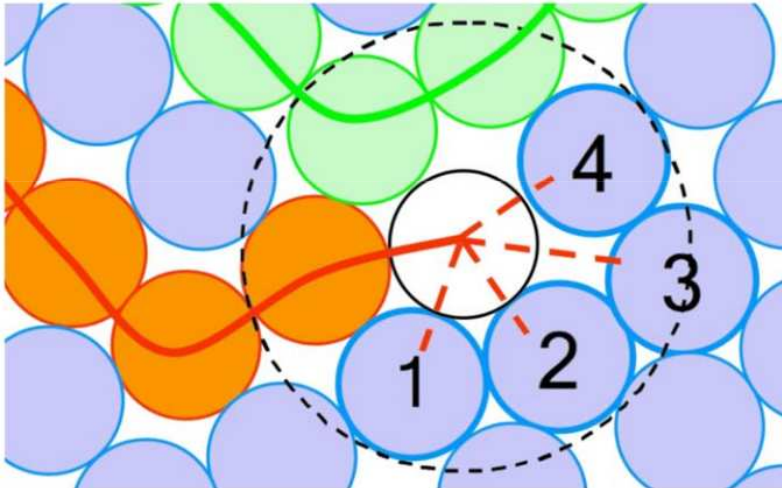


Многомасштабные задачи. Диффузионные явления



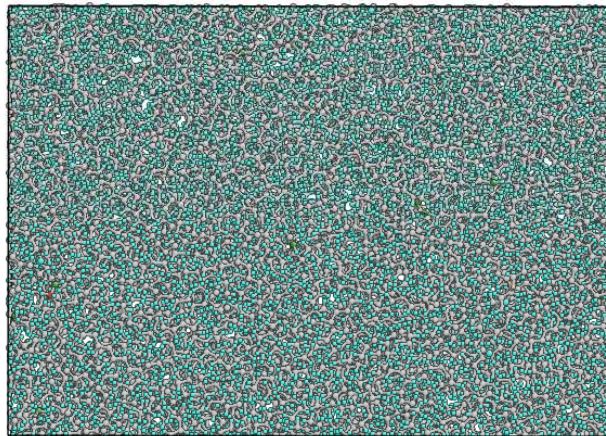
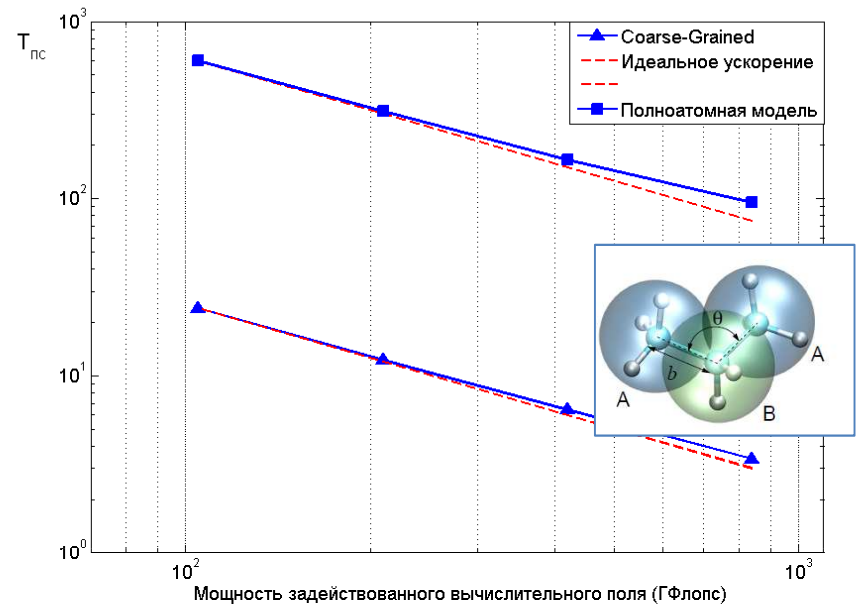
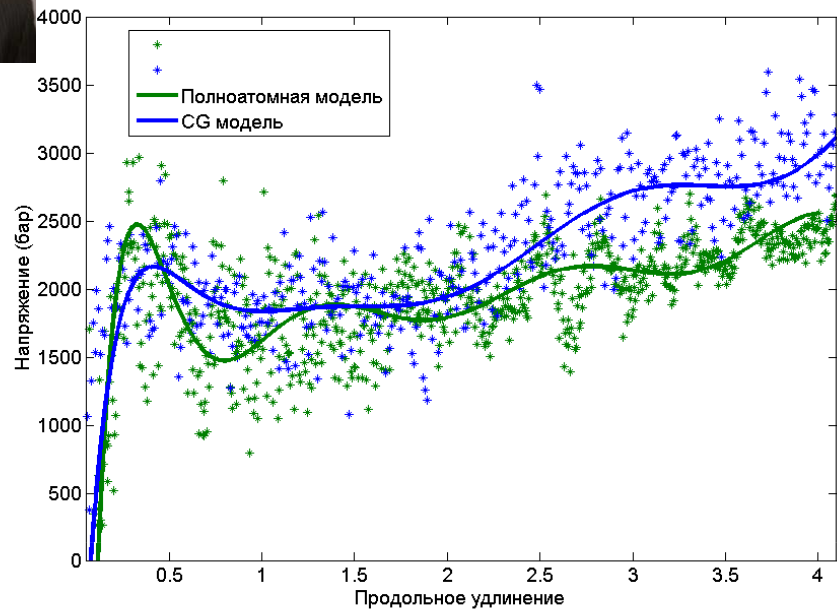
Создание реалистичных моделей полимерных структур

Рост полимерной цепи как «радикальная полимеризация» в ходе МД-моделирования



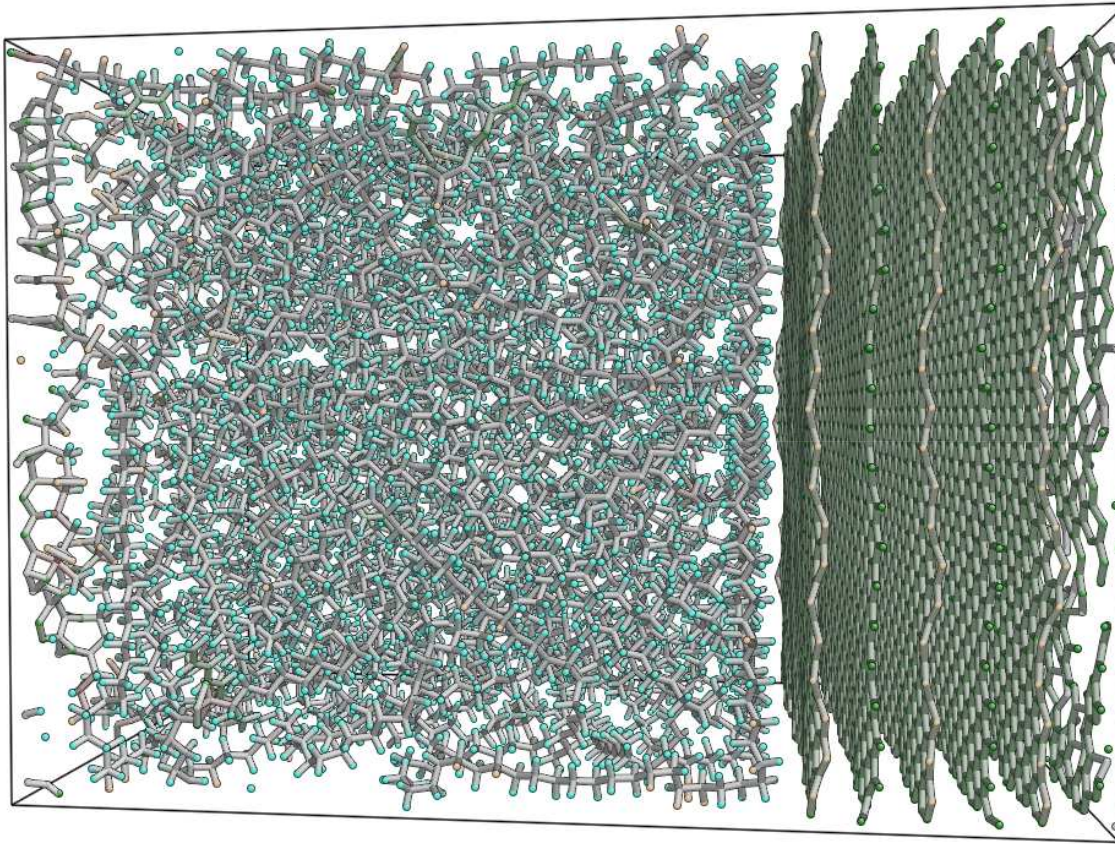


Деформация полиэтилена

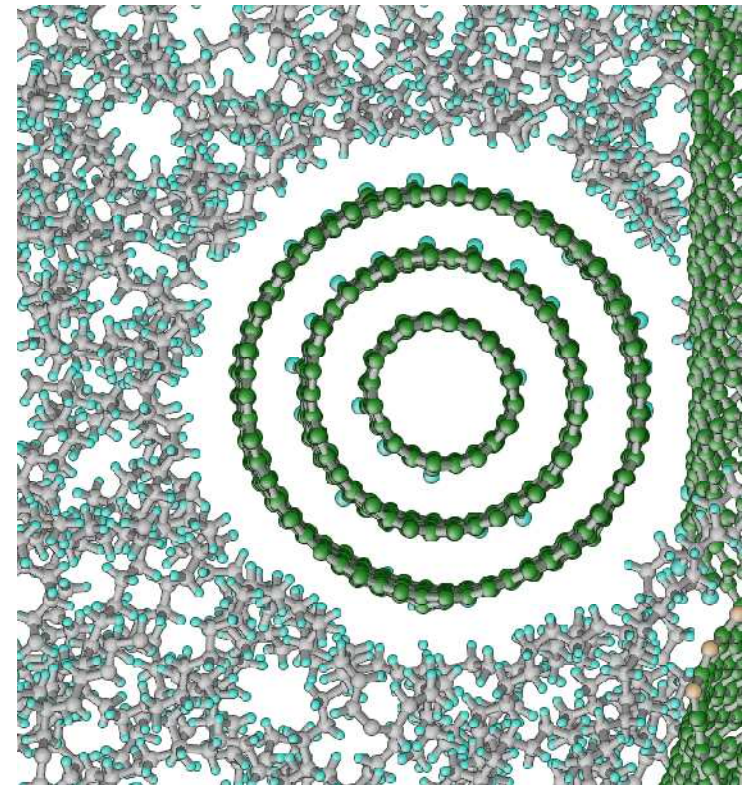




Адгезия между УНТ и полиэтиленом



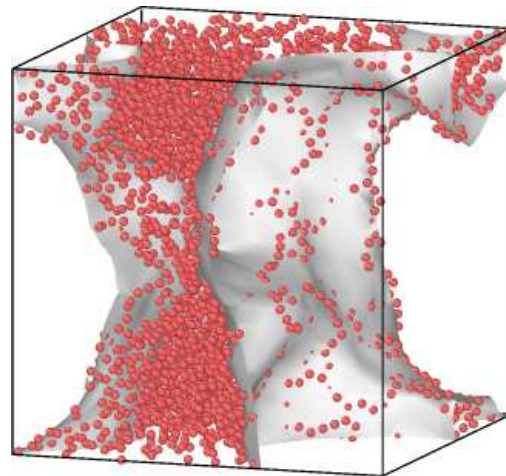
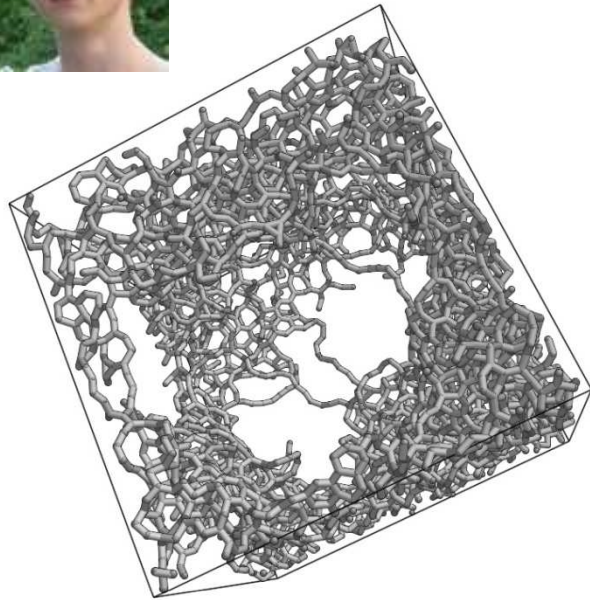
Слоистая графеновая структура



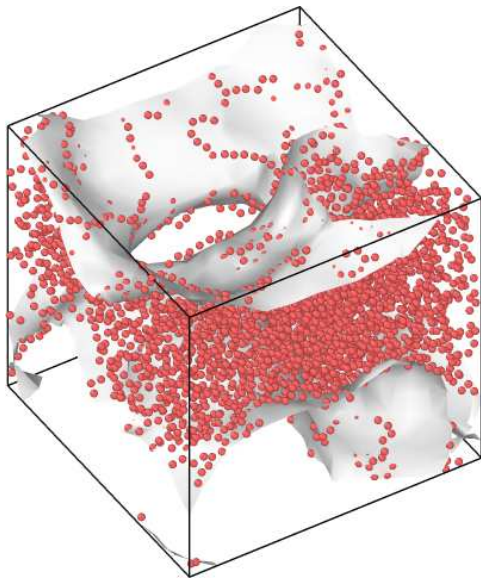
Многостенная УНТ



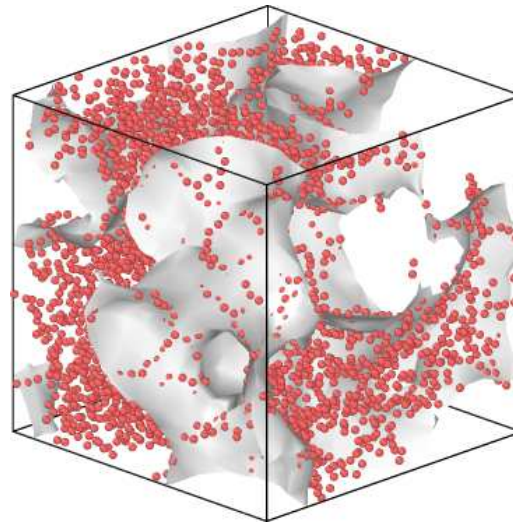
Образование нанопористого углерода и анализ его структуры



20

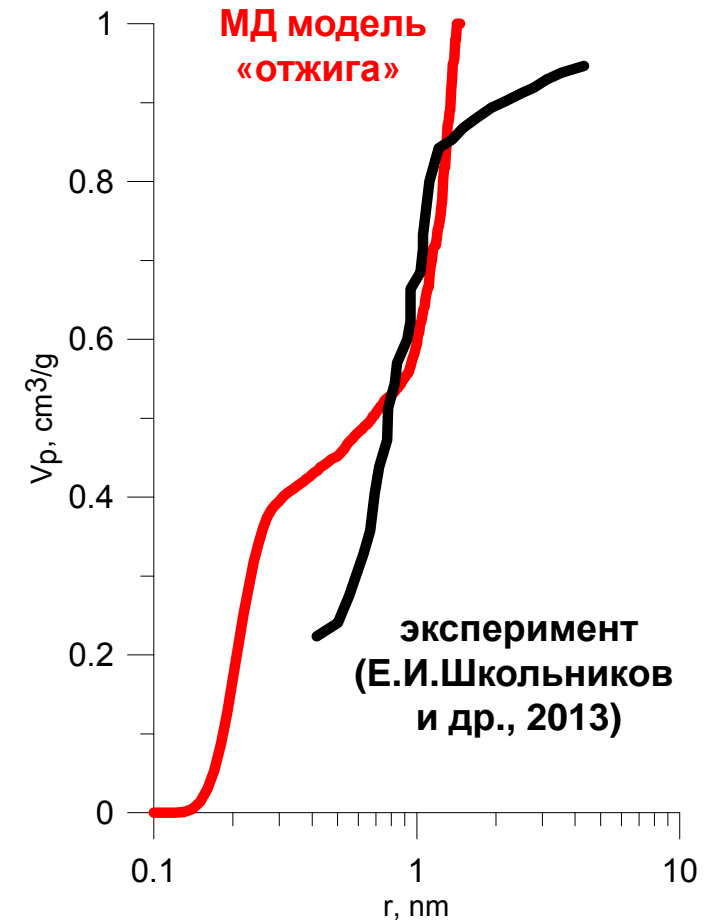


40



80

Кумулятивное
распределение
пор по размерам

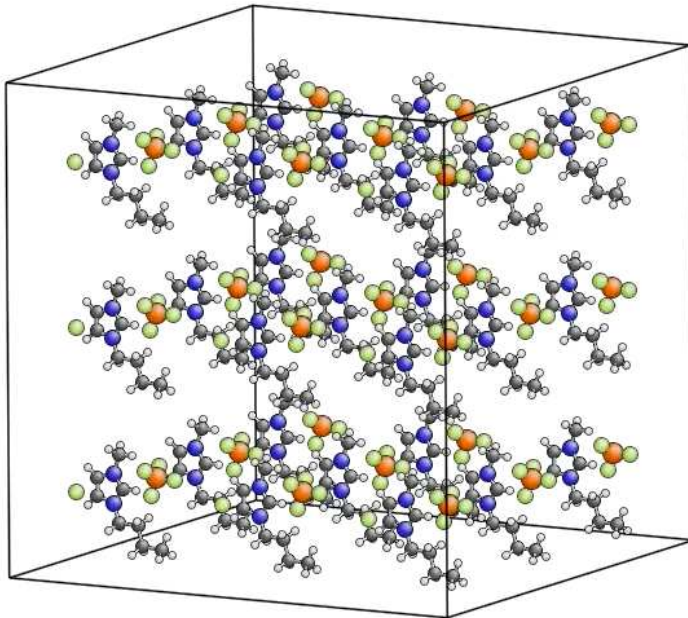
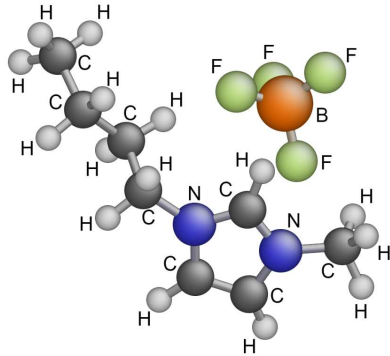




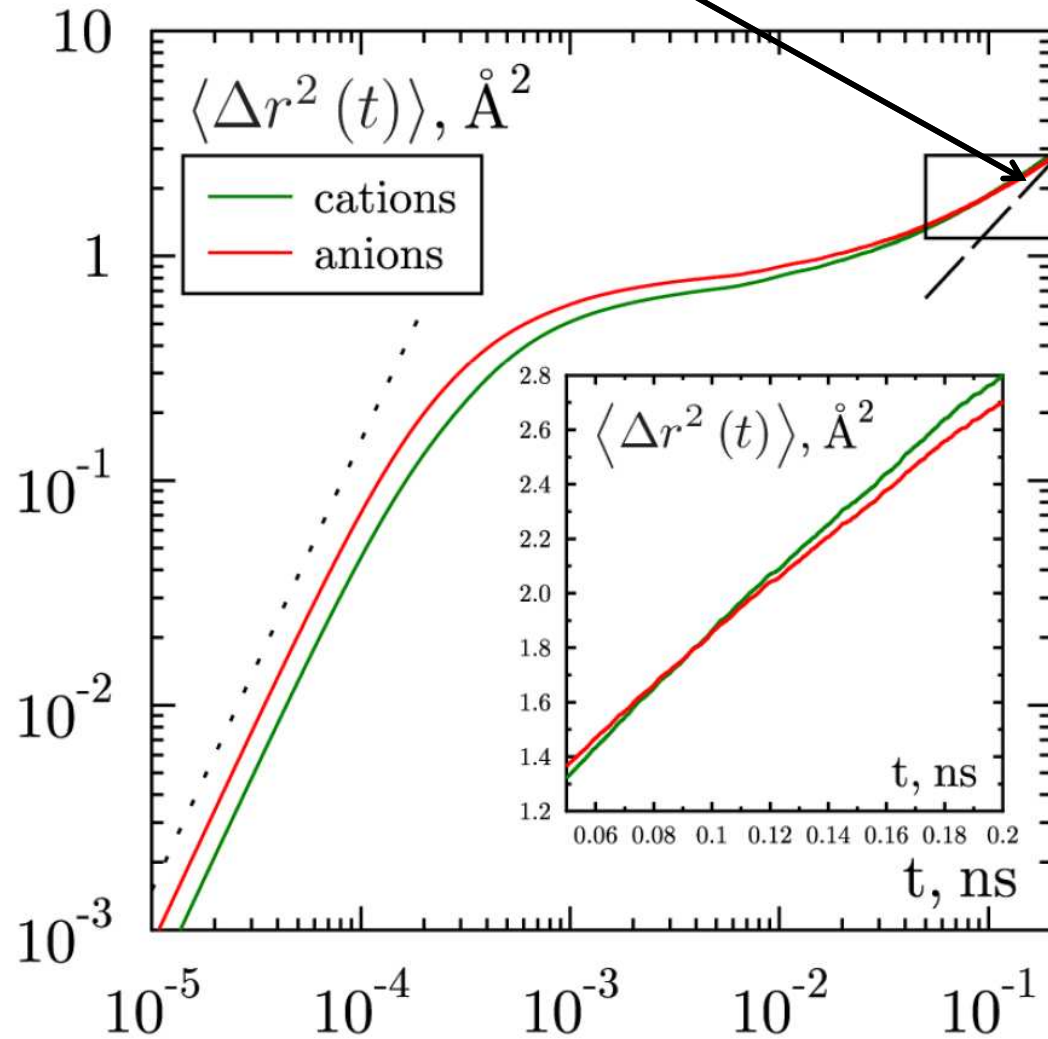
Аномальная диффузия в ионных жидкостях

тетрафторборат

1-бутил-3-метилимидазолия

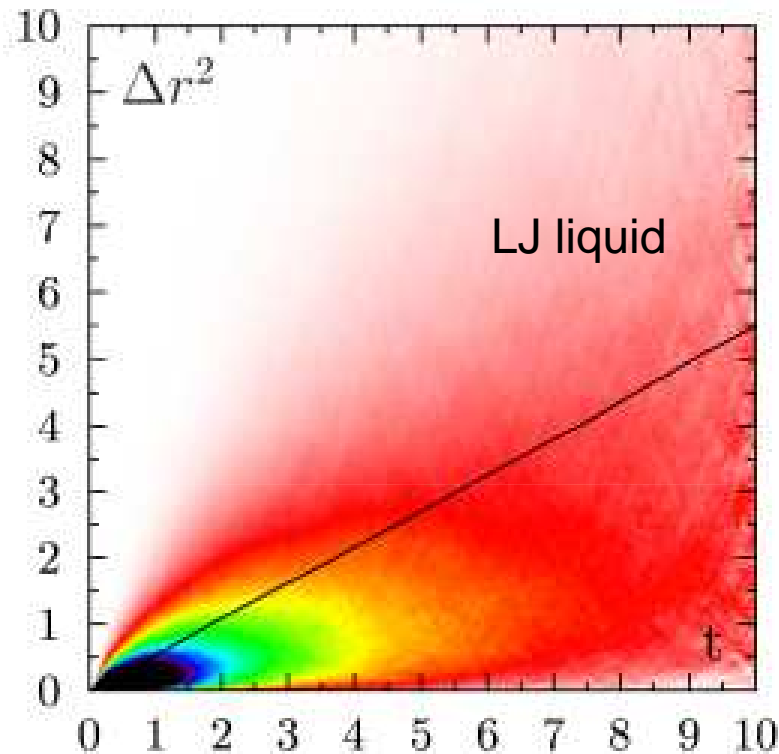


$$\langle \Delta r(t)^2 \rangle = 6Dt$$

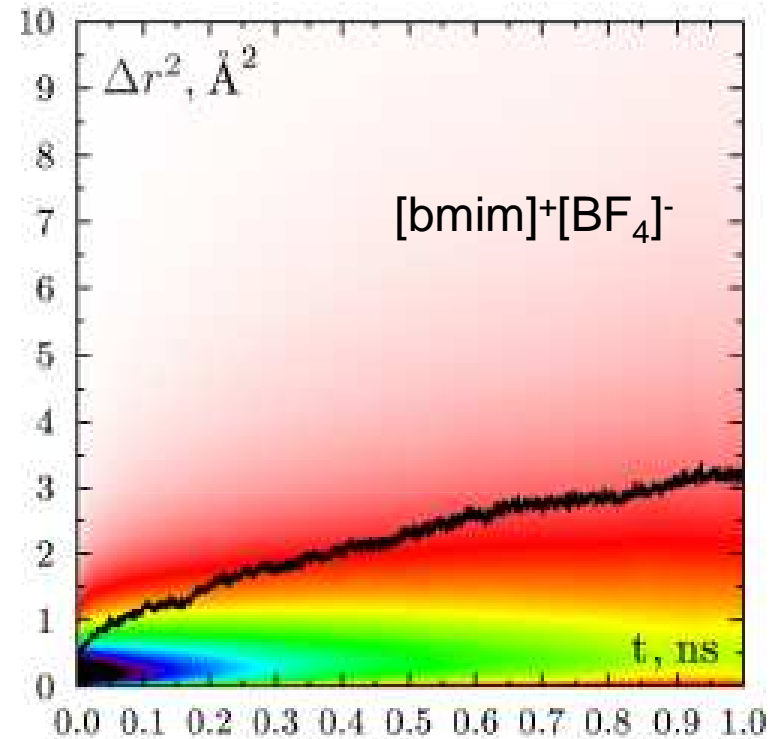




Аномальная диффузия в ионных жидкостях



Выполняется
центральная
предельная теорема
⇓
Нормальная диффузия

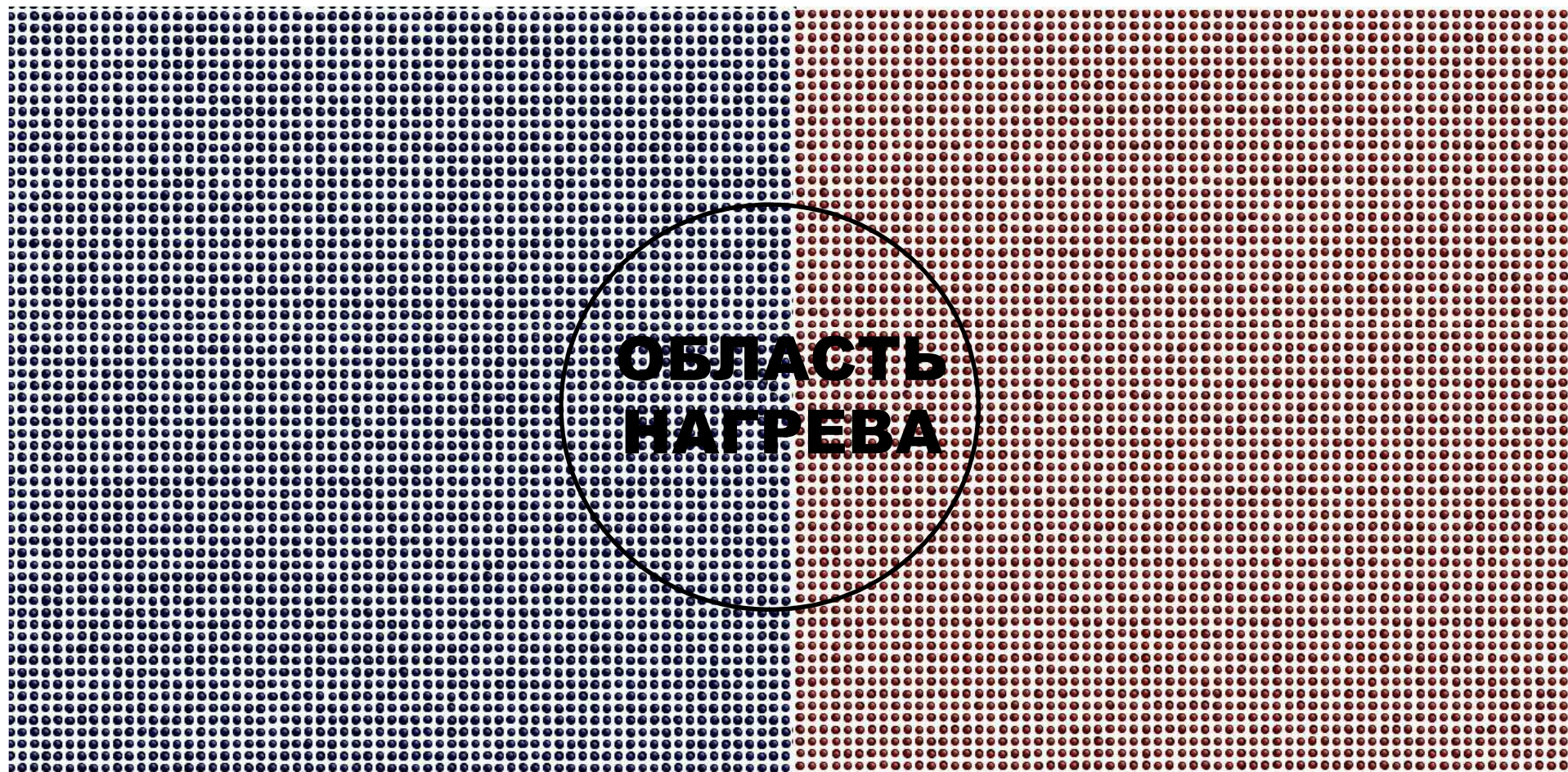


Смещения
характеризуются
распределением Парето
⇓
Аномальная диффузия

Образование дефектов при нагреве/плавлении кислородной подрешётки

(superionic transition)

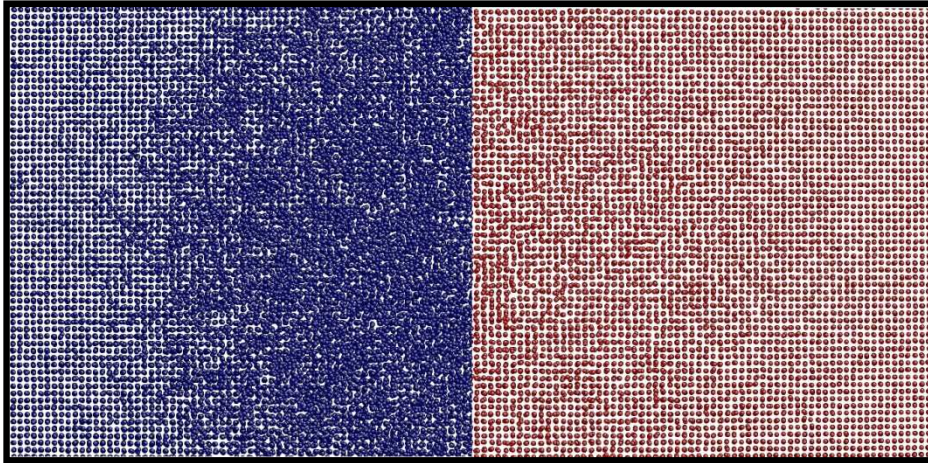
$$dE/dz = 50 \text{ кэВ/нм}$$



кислородная подрешётка

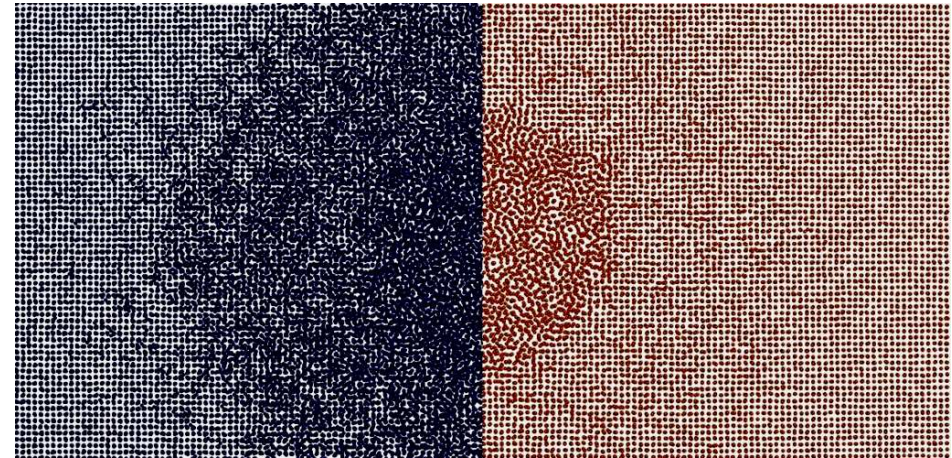
урановая подрешётка

Пороговые значения энерговкладов



superionic transition

$$S_e > 35 \text{ кэВ/нм}$$

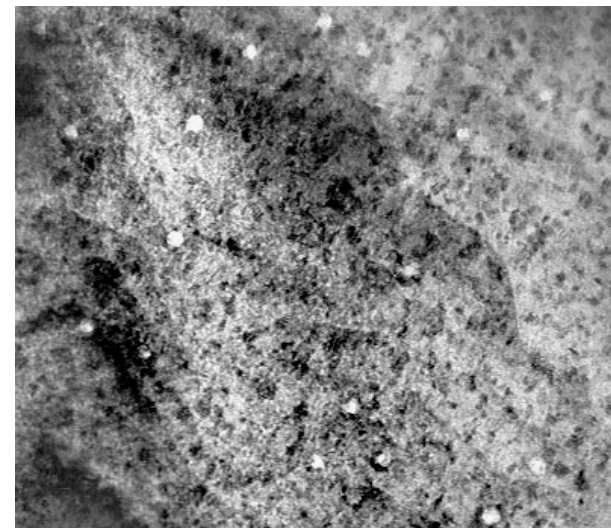


плавление

$$S_e > 65 \text{ кэВ/нм}$$

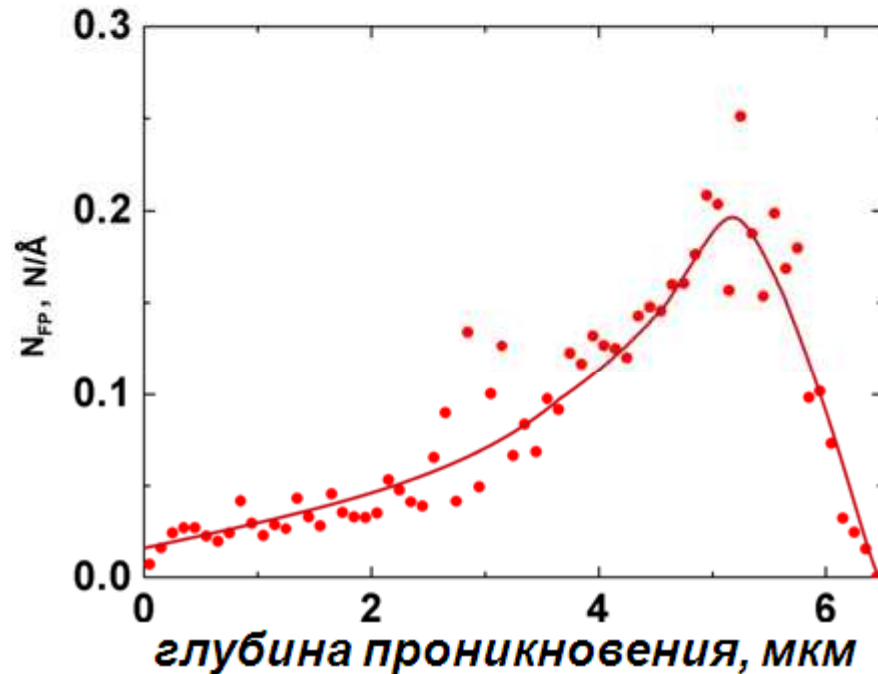


Экспериментальное
наблюдение треков
 $S_e > 29 \text{ кэВ/нм}$
[Matzke, Lucuta, Wiss (2000)]

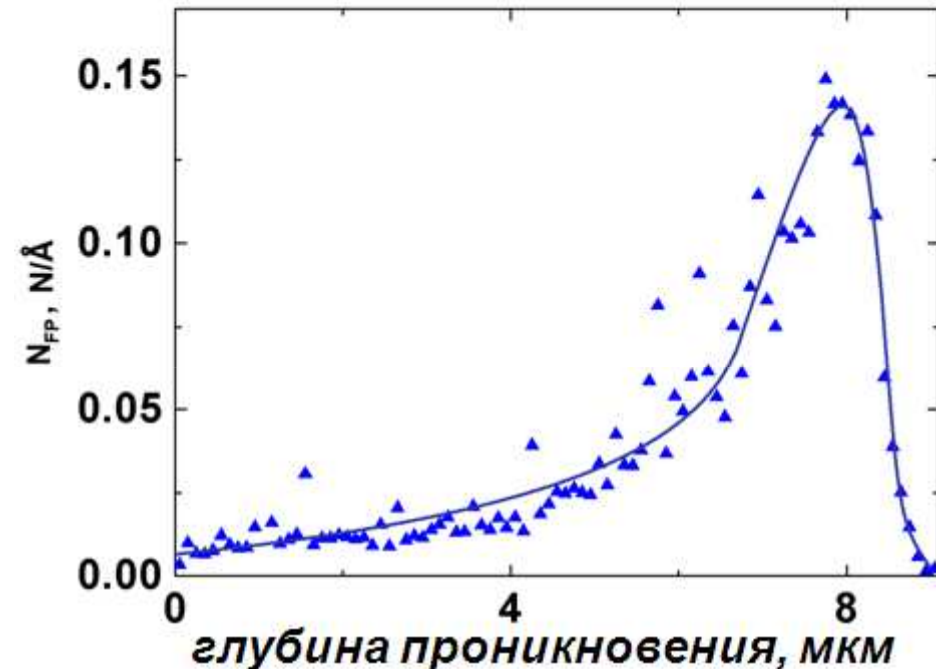


Число дефектов (френкелевских пар) создаваемых осколками деления

Xe (E = 65 МэВ) в UO₂



Mo (E = 95 МэВ) в UO₂



Полное число $N_{U-FP} \sim 10^4$

Полное число $N_{O-FP} \sim 2 \cdot 10^4$

Эксперимент: $N_{U-FP} \sim 4 \cdot 10^4$
[Olander (1976)] [Nilsson (1966)]

Итоги: наш отдел – теоретический,
ориентирован на поиск явлений и эффектов,
и предсказательность моделирования
использует новейшие информационные и
вычислительные технологии,
работает в контакте с экспериментом,
значительное внимание уделяет
прикладным работам.