

АННОТАЦИОННЫЙ ОТЧЕТ

и.о. м.н.с. лаборатории 1.2.2.4 НИЦ-1 ТЭС
Князева Дмитрия Владимировича
по гранту ФПМУ за 2014 – 2015 год

1. Цель проекта

Основной целью работы является расчет переносных и оптических свойств плотной плазмы методом, основанным на квантовой молекулярной динамике и формуле Кубо-Гринвуда.

В рамках данного проекта ставились две конкретные задачи:

- расчет термодинамических свойств плазмиков эффективного состава CH_2 ;
- расчет переносных и оптических свойств плазмиков эффективного состава CH_2 .

2. Метод расчета

Применяемый подход основан на методе квантовой молекулярной динамики, методе функционала плотности и формуле Кубо-Гринвуда.

Атомы вещества заданного химического состава помещаются в вычислительную ячейку. Размер ячейки выбирается таким, чтобы обеспечивать соответствие заданной плотности вещества. Далее производится квантовое молекулярно-динамическое (КМД) моделирование вещества – рассчитываются временные траектории ионов. Температура ионов при этом задается взаимодействием с термостатом Нозе; температура электронов задается с помощью параметра в распределении Ферми-Дирака. В этом проекте рассматривался только случай равенства температуры ионов и температуры электронов.

В ходе КМД-моделирования система приходит к состоянию равновесия. Для расчета термодинамических свойств используются временные зависимости энергии и давления, получаемые на равновесном участке эволюции системы. Путем усреднения этих временных зависимостей получают термодинамические значения энергии и давления. Для усреднения при этом используется большое число последовательных КМД-конфигураций. Теплоемкость при постоянном объеме рассчитывается путем численного дифференцирования энергии по температуре.

Для расчета переносных и оптических свойств с равновесного участка моделирования выбирается небольшое число ионных конфигураций. Для этих выбранных конфигураций сначала производится детальный расчет зонной структуры. В результате получают данные по волновым функциям, уровням энергии и числам заполнения.

Эта информация затем используется для расчета по формуле Кубо-Гринвуда. При расчете оптических свойств формула Кубо-Гринвуда используется для расчета действительной части динамической электропроводности. Динамическая электропроводность, рассчитанная для различных ионных конфигураций, усредняется. По известной динамической электропроводности в дальнейшем могут быть рассчитаны другие оптические свойства.

При расчете переносных свойств формула Кубо-Гринвуда используется для расчета динамических коэффициентов Онзагера. Динамические коэффициенты Онзагера, рассчитанные для различных ионных конфигураций, усредняются. Статические коэффициенты Онзагера затем определяются путем экстраполяции динамических к нулевой частоте. Статическая электропроводность является одним из статических коэффициентов Онзагера. Теплопроводность выражается через комбинацию статических коэффициентов Онзагера.

3. Полученные результаты

Термодинамические, переносные и оптические свойства пластиков эффективного состава CH_2 были рассчитаны при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$ и $5 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$.

Наиболее интересные результаты по термодинамическим свойствам связаны с температурной зависимостью теплоемкости $C_v(T)$ (рис. 1). Теплоемкость убывает при $5 \text{ кК} \leq T \leq 15 \text{ кК}$ и возрастает при $15 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$. При $5 \text{ кК} \leq T \leq 15 \text{ кК}$ происходит процесс, приводящий к уменьшению теплоемкости. Процесс, происходящий со значительным поглощением энергии, может приводить к острому максимуму на зависимости $C_v(T)$. В рассматриваемом случае, вероятно, наблюдается нисходящая ветвь такого максимума.

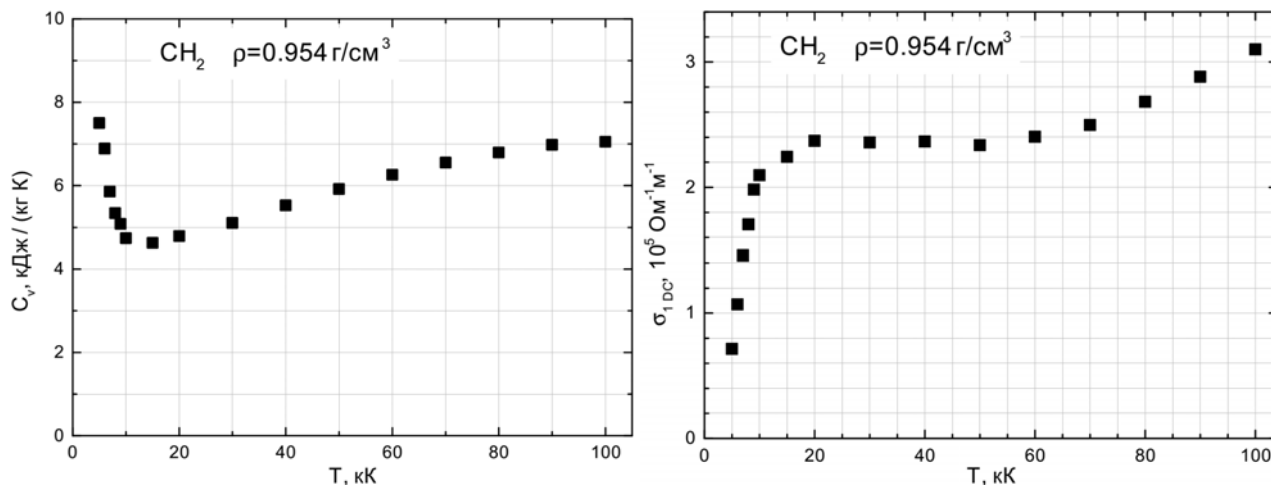


Рис. 1. Немонотонная температурная зависимость теплоемкости $C_v(T)$ пластиков эффективного состава CH_2 .

Рис. 2. Ступенчатая температурная зависимость статической электропроводности $\sigma_{1DC}(T)$ пластиков эффективного состава CH_2 .

Наиболее интересным результатом по переносным свойствам является температурная зависимость статической электропроводности $\sigma_{1DC}(T)$ (рис. 2). $\sigma_{1DC}(T)$ резко возрастает при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$, остается практически неизменной при $20 \text{ кК} \leq T \leq 60 \text{ кК}$ и снова немного возрастает при $60 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$. Следует отметить, что резкий рост электропроводности происходит в том же диапазоне температур, что и падение теплоемкости.

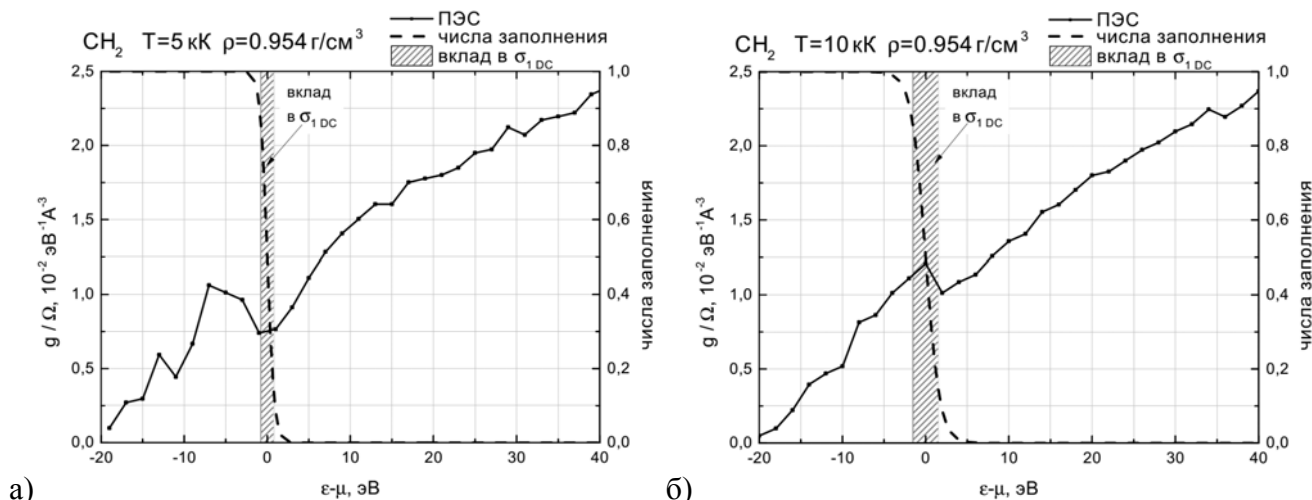


Рис. 3. Объяснение быстрого роста σ_{1DC} при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$. (а) $T = 5 \text{ кК}$. (б) $T = 10 \text{ кК}$.

Также было дано объяснение быстрого роста электропроводности, основанное на анализе плотности электронных состояний (ПЭС) (см. рис. 3). Сплошной линией изображена

ПЭС $g(\varepsilon)$, отнесенная к объему вычислительной ячейки Ω . Штриховой линией изображено распределение Ферми-Дирака $f(\varepsilon)$. Штриховкой обозначена область энергий электронов ε , дающих наибольший вклад в статическую электропроводность σ_{1DC} (область определяется как ширина на половине высоты кривой $-\partial f/\partial \varepsilon(\varepsilon)$).

При $T = 5$ кК (рис. 3а) область энергий, дающих существенный вклад в σ_{1DC} , приходится на провал на плотности электронных состояний. Вклад в σ_{1DC} дает небольшое число электронов, поэтому электропроводность низкая.

При $T = 10$ кК (рис. 3б) область энергий, дающих существенный вклад в σ_{1DC} , приходится на большую ПЭС, чем при $T = 5$ кК. Вклад в σ_{1DC} дает большее число электронов, поэтому и электропроводность при $T = 10$ кК выше.

4. Выводы

В ходе работ по проекту ФПМУ за 2014 – 2015 год для пластика эффективного состава CH_2 были рассчитаны термодинамические, переносные и оптические свойства при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$ и $5 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$. Быстрый рост статической электропроводности при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$ объяснен с помощью анализа плотности электронных состояний.

Статьи в рецензируемых изданиях

1. Knyazev D.V., Levashov P.R. “*Ab initio* calculation of thermodynamic, transport, and optical properties of CH_2 plastics”. *Phys Plasmas* **22**, 053303 (2015).
<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/pop/22/5/10.1063/1.4919963>

Статьи в сборниках трудов конференций

1. Knyazev D.V., Levashov P.R. “Transport and optical properties of CH_2 plastics: *ab initio* calculation and density-of-states-based analysis”. *Journal of Physics: Conference Series*. 2015. Accepted Manuscript. <http://www.ihed.ras.ru/elbrus15/proc/articles/>

Личные доклады на конференциях

1. XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, February 28 – March 6, 2015, Elbrus, Russia. “Thermodynamic, transport and optical properties of plastics by the *ab initio* calculation” – стендовый доклад.
2. 7th International EMMI Workshop on Plasma Physics with Intense Heavy Ion and Laser Beams at FAIR, December 9-10, 2014, Moscow, Russia. “Thermodynamic, transport and optical properties of plastics, used for the contrast improvement of intense laser pulses” – устный доклад.
3. Научно-координационная сессия «Исследования неидеальной плазмы», 2-3 декабря 2014, Москва, Россия. «Первопринципный расчет термодинамических, переносных и оптических свойств пластика» - устный доклад.
4. 57-я научная конференция МФТИ: Всероссийская научная конференция с международным участием: «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в области физики», Всероссийская молодежная научная конференция с международным участием «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в современном информационном обществе». 28 ноября 2014, Москва, Россия. «Переносные и оптические свойства алюминия в двухтемпературном случае: первопринципный расчет и полуэмпирическая аппроксимация» - устный доклад.

5. Youth School-Seminar “The Contribution of young Russian scientists in the project FAIR”, November 18-19, 2014, Moscow, Russia. “First-principle calculation of thermodynamic, transport and optical properties of plastics, used for the contrast improvement of intense laser pulses” – устный доклад.

Тезисы конференций

1. Knyazev D.V., Levashov P.R. “Thermodynamic, transport and optical properties of plastics by the ab initio calculation”. XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter, Book of Abstracts, 60-61 (2015).
2. Knyazev D.V., Levashov P.R. “Thermodynamic, transport and optical properties of plastics, used for the contrast improvement of intense laser pulses”. 7th International EMMI Workshop on Plasma Physics with Intense Heavy Ion and Laser Beams at FAIR, Abstracts (2014).
<http://ihed.ras.ru/wlib2014/program/restore.php?id=314>
3. Князев Д.В., Левашов П.Р. «Первопринципный расчет термодинамических, переносных и оптических свойств пластика». Тезисы Научно-координационной Сессии «Исследования неидеальной плазмы» (2014).
http://ihed.ras.ru/npp2014/program/restore_rus.php?id=951
4. Князев Д.В., Левашов П.Р. «Переносные и оптические свойства алюминия в двухтемпературном случае: первопринципный расчет и полуэмпирическая аппроксимация». Труды 57-й научной конференции МФТИ: Всероссийской научной конференции с международным участием «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в области физики», Всероссийской молодежной научной конференции с международным участием «Актуальные проблемы фундаментальных и прикладных наук в современном информационном обществе». Молекулярная и химическая физика. 90-92 (2014).