

На правах рукописи

КНЯЗЕВ Дмитрий Владимирович

**РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И
ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ
МЕТОДА КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И
ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА**

01.04.08 – физика плазмы

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2015

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

Научный руководитель: к. ф.-м. н., зав. лабораторией,
ОИВТ РАН, г. Москва,
Левашов Павел Ремирович.

Официальные оппоненты: д. ф.-м. н., старший научный сотрудник,
зав. лабораторией,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург,
Волков Николай Борисович;

к. ф.-м. н., старший научный сотрудник,
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, г. Москва,
г. Троицк,
Магницкая Мария Викторовна.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, г. Москва.

Защита состоится «_____» _____ 2015 г. в ____ ч. ____ мин. на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук по адресу: 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, корпус Л-3, экспозиционный зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИВТ РАН.

Автореферат разослан «_____» _____ 2015 г.

Отзывы на автореферат просьба присылать по адресу: 125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, ОИВТ РАН.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к. ф.-м. н.



М.М. Васильев

© Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, 2015

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Эта работа посвящена расчету электронных переносных и оптических свойств плотной плазмы при высоких температурах. Под переносными свойствами подразумеваются статическая электропроводность и теплопроводность; под оптическими свойствами — динамическая электропроводность, комплексная диэлектрическая проницаемость и другие. Рассчитываются переносные и оптические свойства алюминиевой плазмы и плазмы эффективного состава CH_2 . Расчет основан на квантовом молекулярно-динамическом моделировании, методе функционала плотности и формуле Кубо-Гринвуда.

Используемые сокращения и обозначения:

$\sigma_{1\text{DC}}$ — статическая электропроводность;

$\sigma_1(\omega)$ — действительная часть динамической (высокочастотной) электропроводности, зависящей от частоты ω ;

K — теплопроводность с учетом термоэлектрического члена;

L_{22} — теплопроводность без учета термоэлектрического члена;

T_i — температура ионов;

T_e — температура электронов;

T — температура электронов и ионов в случае $T_i = T_e = T$;

КМД — квантовая молекулярная динамика;

КМД+КГ — основанный на квантовой молекулярной динамике и формуле Кубо-Гринвуда; выражение «КМД+КГ расчет» является синонимом выражения «расчет методом, используемым в этой работе»;

ПЭС — плотность электронных состояний;

VASP — Венский пакет для первопринципного моделирования (*Vienna ab initio simulation package*) — программный пакет, используемый в этой работе.

Актуальность темы. В настоящее время распространены эксперименты, в которых значительная энергия вкладывается в вещество за небольшое время. К числу таких экспериментов относятся: фемтосекундный лазерный нагрев, воздействие на вещество пучков тяжелых ионов, эксперименты по электровзрыву. В результате вложения энергии вещество проходит через различные области фазовой диаграммы, в том числе, через состояние плотной плазмы.

При численном моделировании таких экспериментов необходима информация о свойствах вещества в различных областях фазовой диаграммы, в том числе данные по его электропроводности, теплопроводности и оптическим свойствам. Поставить эксперимент для измерения свойств в состоянии плотной плазмы зачастую весьма затруднительно.

Возможным решением этой проблемы могут служить расчеты свойств вещества. В этой работе производится такой расчет, основанный на квантовом молекулярно-динамическом моделировании, методе функционала плот-

ности и формуле Кубо-Гринвуда. Преимуществом такого расчета является одновременный учет квантовых свойств электронов (в некотором приближении) и сложного взаимного расположения ионов. Также достоинством является то, что с использованием однажды построенных обменно-корреляционных функционалов и псевдопотенциалов оказывается возможным рассчитать свойства для большого числа веществ в различных условиях. При этом нет необходимости в привлечении эмпирической информации по свойствам вещества.

Расчеты таким методом стали возможны только в последнее время в связи с развитием высокопроизводительных суперкомпьютеров. Расчеты аналогичным методом широко применяются зарубежными исследовательскими группами.

Таким образом, метод расчета, используемый в этой работе, является вполне современным. Результаты расчета находят практическое применение при моделировании экспериментов в области физики экстремальных состояний вещества. Эти факторы и обуславливают актуальность этой работы.

Цель диссертационной работы состоит в получении новых данных по электропроводности, теплопроводности и оптическим свойствам плотной плазмы методом расчета, основанным на квантовой молекулярной динамике и формуле Кубо-Гринвуда.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Была написана, отлажена и протестирована параллельная программа, осуществляющая расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств по формуле Кубо-Гринвуда.
2. Была исследована зависимость результатов от технических параметров расчета; была произведена оценка погрешности расчета.
3. Было произведено сравнение результатов с расчетами других авторов аналогичным методом, справочными и экспериментальными данными.
4. Были произведены практические расчеты электропроводности, теплопроводности и оптических свойств алюминиевой плазмы (в том числе, в двухтемпературном случае) и плазмы эффективного состава CH_2 .

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. В работе впервые было проведено систематическое исследование зависимости результатов расчета от используемых технических параметров.
2. Впервые используемым методом были произведены расчеты со столь высоким числом атомов алюминия в ячейке, как 1372.
3. Впервые было произведено систематическое исследование электропроводности, теплопроводности и оптических свойств алюминиевой плазмы в двухтемпературном случае. Было установлено, что полученные свойства при $\rho = 2.70 \text{ г/см}^3$, $3 \text{ кК} \leq T_i \leq T_e \leq 20 \text{ кК}$ могут быть описаны теорией Друде со временем релаксации $\tau(T_i) \propto T_i^{-0.25}$.
4. Впервые было установлено, что в двухтемпературной алюминиевой

плазме при $\rho = 2.70 \text{ г/см}^3$, $3 \text{ кК} \leq T_i \leq T_e \leq 20 \text{ кК}$ статическая электропроводность $\sigma_{1\text{DC}}$ зависит только от T_i , но не от T_e .

5. Впервые используемым методом был произведен расчет термодинамических, переносных и оптических свойств плазмы эффективного состава CH_2 при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$ и $5 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$.

Научная и практическая значимость

1. В работе детально описаны метод расчета, используемые технические параметры расчета и зависимость результатов от используемых параметров. Эта информация может быть полезной при проведении сходных расчетов в будущем.
2. В работе рассчитаны переносные и оптические свойства алюминиевой плазмы при нормальной плотности в двухтемпературном случае. Эти данные необходимы при моделировании фемтосекундных лазерных экспериментов. Данные представлены в форме, удобной для практического использования — в виде эмпирической аппроксимации.
3. В работе рассчитаны термодинамические, переносные и оптические свойства плазмы эффективного состава CH_2 . Эта информация может быть применена при моделировании экспериментов по улучшению контраста мощных лазерных импульсов, ударноволновых экспериментов и экспериментов по фемтосекундному лазерному нагреву.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

1. Эмпирическая аппроксимация, описывающая динамическую электропроводность $\sigma_1(T_i, T_e, \omega)$, статическую электропроводность $\sigma_{1\text{DC}}(T_i, T_e)$, теплопроводность без учета термоэлектрического члена $L_{22}(T_i, T_e)$ двухтемпературной алюминиевой плазмы при $\rho = 2.70 \text{ г/см}^3$, $3 \text{ кК} \leq T_i \leq T_e \leq 20 \text{ кК}$.
2. Зависимости $\sigma_1(T_i, T_e, \omega)$, $\sigma_{1\text{DC}}(T_i, T_e)$, $L_{22}(T_i, T_e)$ для двухтемпературной алюминиевой плазмы при $\rho = 2.70 \text{ г/см}^3$, $3 \text{ кК} \leq T_i \leq T_e \leq 20 \text{ кК}$ могут быть описаны теорией Друде со временем релаксации $\tau(T_i)$, убывающим медленнее, чем $\propto T_i^{-1}$. При указанных плотности и температурах $\tau(T_i)$ хорошо аппроксимируется выражением $\propto T_i^{-0.25}$.
3. Для плазмы эффективного состава CH_2 при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$ статическая электропроводность $\sigma_{1\text{DC}}$ резко возрастает при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$ и остается практически постоянной при $20 \text{ кК} \leq T \leq 60 \text{ кК}$. Резкий рост $\sigma_{1\text{DC}}$ связан с ростом плотности электронных состояний при энергии электронов ϵ , равной химическому потенциалу μ .
4. Недрудевские зависимости $\sigma_1(\omega)$ для плазмы эффективного состава CH_2 при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$, $5 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$.
5. Для плазмы эффективного состава CH_2 при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$ теплоемкость C_v убывает при $5 \text{ кК} \leq T \leq 15 \text{ кК}$ и возрастает при $15 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на 9-м Российском симпозиуме «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Абхазия, Новый Афон, 2011), Молодежной школе-семинаре «Физика вещества с высокой концентрацией энергии» (Россия, Москва, 2011), 54-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2011), XXVII International Conference on Equations of State for Matter (Россия, Эльбрус, 2012), 10-м Российском симпозиуме «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Абхазия, Новый Афон, 2012), 14th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (Германия, Росток, 2012), Молодежной школе-семинаре «Вклад молодых ученых России в проект FAIR» (Россия, Москва, 2012), 55-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2012), XXVIII International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Эльбрус, 2013), 7th International Workshop on Warm Dense Matter (Франция, Сен-Мало, 2013), 11-м Российском симпозиуме «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (Абхазия, Новый Афон, 2013), 5th International EMMI Workshop «High energy density plasma diagnostic at FAIR: Novel laser based photon and particle sources» (Германия, Дармштадт, GSI, 2013), Youth School-Seminar «The Contribution of young Russian scientists in the project FAIR» (Россия, Москва, 2013), 56-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2013), Научно-координационной Сессии «Исследования неидеальной плазмы» (Россия, Москва, 2013), XXIX International Conference on Equations of State for Matter (Россия, Эльбрус, 2014), 26th Symposium on Plasma Physics and Technology (Чехия, Прага, 2014), 41st European Physical Society Conference on Plasma Physics (Германия, Берлин, 2014), 16th International Workshop on Radiative Properties of Hot Dense Matter (Австрия, Вена, 2014), XIV Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ (Россия, Казань, 2014), Youth School-Seminar «The Contribution of young Russian scientists in the project FAIR» (Россия, Москва, 2014), 57-й научной конференции МФТИ (Россия, Москва, 2014), Научно-координационной Сессии «Исследования неидеальной плазмы» (Россия, Москва, 2014), 7th International EMMI Workshop on Plasma Physics with Intense Heavy Ion and Laser Beams at FAIR (Россия, Москва, 2014), XXX International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Россия, Эльбрус, 2015).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 29 печатных работах, из них 4 статьи в рецензируемых журналах из перечня ВАК.

Личный вклад автора. Диссертация написана автором лично. Положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором. Лично автором написана и протестирована параллельная программа, осуществляющая расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств по формуле Кубо-Гринвуда. Расчеты, результаты которых изложены в диссертации, произ-

ведены автором лично. Интерпретация результатов проведена при определяющем участии автора. Публикация полученных результатов осуществлялась совместно с соавторами, при этом вклад диссертанта был определяющим.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из предисловия, списка сокращений и обозначений, введения, обзора литературы, 6 глав, заключения, 2 приложений и списка литературы. Общий объем диссертации 240 страниц, включая 39 рисунков и 7 таблиц. Список литературы включает 117 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В обзоре литературы на примере задачи о моделировании фемтосекундного лазерного нагрева объясняется необходимость расчета переносных и оптических свойств. Рассказывается о месте метода, используемого в этой работе, среди других методов расчета переносных и оптических свойств. Приводится краткий обзор развития используемого метода, рассказывается об основных работах, предшествующих этой. Кратко излагается, что нового сделано в этой работе, по сравнению с уже опубликованными. Обсуждается, почему вещество в условиях, рассматриваемых в диссертации, может считаться плазмой.

В первой главе излагается метод расчета, используемый в работе. Расчет основан на квантовой молекулярной динамике (КМД), методе функционала плотности (МФП) и формуле Кубо-Гринвуда. Входными физическими параметрами метода являются брутто-состав вещества, плотность ρ , температуры ионов и электронов T_i и T_e . Расчет состоит из трех основных этапов.

На первом этапе производится КМД-моделирование. В кубическую ячейку помещаются атомы, соответствующие брутто-составу вещества. Обычно в этой работе в ячейке находится $100 \div 250$ атомов (в отдельных расчетах до 1372). Размер ячейки задается в соответствии с плотностью ρ .

На каждом шаге КМД-моделирования для заданного положения ионов производится расчет электронной структуры методом функционала плотности. Для общего понимания можно считать, что решаются уравнения Кона-Шэма вида:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \sum_{\text{at}} \frac{-Z_{\text{at}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\text{at}}|} + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + v_{xc}(n(\mathbf{r}), \nabla n(\mathbf{r}), \dots) \right] \Psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$n(\mathbf{r}) = 2 \sum_i f(\epsilon_i) |\Psi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (2)$$

$$f(\epsilon_i) = \frac{1}{\exp \frac{\epsilon_i - \mu}{kT_e} + 1}. \quad (3)$$

Уравнения Кона-Шэма (1) имеют вид одноэлектронных уравнений Шредингера

ра с потенциалом, который некоторым сложным образом зависит от электронной плотности $n(\mathbf{r})$. Через формулу (2) плотность $n(\mathbf{r})$ зависит от волновых функций $\Psi_i(\mathbf{r})$, получаемых при решении уравнений Кона-Шэма. Получается самосогласованная задача, которая решается итерационным методом. Числа заполнения $f(\epsilon_i)$ задаются распределением Ферми-Дирака (3), которое определяет зависимость расчета от T_e . В простейшем случае используются периодические граничные условия (или набор различных граничных условий — тогда говорят о наборе \mathbf{k} -точек).

На каждом шаге КМД-моделирования рассчитываются силы, действующие на классические ионы со стороны электронов и других ионов. Также на ионы действуют фиктивные силы со стороны термостата Нозе; с помощью взаимодействия с термостатом задается T_i .

Знание сил, действующих на ионы, позволяет численно проинтегрировать уравнения движения ионов и рассчитать временную эволюцию системы.

В ходе КМД-моделирования система приходит в состояние равновесия. На равновесном участке моделирования рассчитываются ионные траектории, временные зависимости энергии $E(t)$ и давления $p(t)$. Усреднением по времени вычисляются термодинамические E и p . Теплоемкость при постоянном объеме C_v рассчитывается как $(dE/dT)_\rho$. С равновесного участка моделирования выбираются отдельные ионные конфигурации для последующего расчета переносных и оптических свойств.

На втором этапе для каждой из выбранных ионных конфигураций вновь производится расчет электронной структуры с помощью МФП. Решаются те же уравнения (1)–(3), что и при КМД-моделировании, но с техническими параметрами, дающими бóльшую точность. Так делается потому, что точность определения электронной структуры при КМД-моделировании часто оказывается недостаточной для последующего расчета переносных и оптических свойств.

На третьем этапе действительная часть динамической электропроводности $\sigma_1(\omega)$ рассчитывается по формуле Кубо-Гринвуда:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{2\pi e^2 \hbar^2}{3m_e^2 \omega \Omega} \sum_{ij,\alpha} \left| \langle \Psi_i | \nabla_\alpha | \Psi_j \rangle \right|^2 (f(\epsilon_i) - f(\epsilon_j)) \delta(\epsilon_j - \epsilon_i - \hbar\omega). \quad (4)$$

При этом используются $\Psi_i(\mathbf{r})$, $f(\epsilon_i)$ и ϵ_i , полученные на втором этапе.

Физический смысл формулы Кубо-Гринвуда таков. Величина $\sigma_1(\omega)$ показывает, насколько хорошо электроны в рассматриваемой системе поглощают энергию электрического поля с частотой ω . Микроскопически под действием электрического поля электроны переходят с уровня на уровень. Формула Кубо-Гринвуда основана на микроскопическом подсчете поглощенной энергии: рассматриваются переходы между всевозможными уровнями (суммирование по i и j в (4)). Электрическое поле с частотой ω приводит к переходу лишь

между уровнями, удовлетворяющими закону сохранения энергии $\epsilon_j - \epsilon_i = \hbar\omega$ (δ -функция в (4)). Скорость перехода между уровнями с одинаковыми числами заполнения равна нулю, поэтому в (4) возникает множитель $f(\epsilon_i) - f(\epsilon_j)$. Каждому переходу присуща еще некоторая «интенсивность», за нее отвечают квадраты модулей матричных элементов оператора скорости $\left| \langle \Psi_i | \nabla_\alpha | \Psi_j \rangle \right|^2$ в формуле (4).

Значения $\sigma_1(\omega)$, вычисленные с помощью (4) для различных ионных конфигураций, усредняются. Зная $\sigma_1(\omega)$, можно рассчитать и другие оптические свойства. Статическая электропроводность σ_{1DC} определяется экстраполяцией $\sigma_1(\omega)$ к нулевой частоте.

Для расчета теплопроводности нужно сначала вычислить коэффициенты Онзагера L_{mn} , $m, n = 1, 2$. Эти коэффициенты связывают существующие в веществе электрическое поле \mathbf{E} и градиент температуры ∇T_e с возникающими плотностью электрического тока \mathbf{j} и плотностью потока энергии \mathbf{j}_E :

$$\mathbf{j} = L_{11} \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla\mu}{e} \right) + L_{12}(-\nabla T_e), \quad (5)$$

$$\mathbf{j}_E + \frac{\mu}{e} \mathbf{j} = L_{21} \left(\mathbf{E} + \frac{\nabla\mu}{e} \right) + L_{22}(-\nabla T_e). \quad (6)$$

Динамические коэффициенты Онзагера $L_{mn}(\omega)$, $m, n = 1, 2$ рассчитываются по формуле Кубо-Гринвуда (более сложной, чем (4); приведена в диссертации). $L_{mn}(\omega)$ усредняются по ионным конфигурациям, после этого L_{mn} рассчитываются как $\lim_{\omega \rightarrow 0} L_{mn}(\omega)$.

Теплопроводность определяется как коэффициент, связывающий \mathbf{j}_E и ∇T_e при условии $\mathbf{j} = 0$ (при измерении теплопроводности образец не подключен к электрической цепи). Из (5)–(6) теплопроводность выражается через L_{mn} :

$$K = L_{22} - \frac{L_{12}L_{21}}{L_{11}}. \quad (7)$$

Теплопроводность K не совпадает с коэффициентом Онзагера L_{22} ; в (7) есть еще второе слагаемое, называемое термоэлектрическим членом.

Первый и второй этапы расчета осуществляются с помощью программного пакета VASP. Третий этап производится с помощью параллельной программы, написанной автором диссертации. Она использует информацию по $\Psi_i(\mathbf{r})$, ϵ_i , $f(\epsilon_i)$, получаемую в VASP.

Помимо метода, используемого в этой работе, существуют и другие модели переносных и оптических свойств. Такие модели обсуждаются **во второй главе**. Для плотных металлов при температурах, много меньших температуры Ферми, рассмотренные модели сводятся к теории Друде (точнее, к теории Зоммерфельда). Для сильновырожденного электронного газа справедливы форму-

лы Друде (Зоммерфельда) для динамической электропроводности:

$$\sigma_1(\omega) = \frac{\sigma_{1\text{DC}}}{1 + \omega^2\tau^2}, \quad (8)$$

статической электропроводности:

$$\sigma_{1\text{DC}} = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e}, \quad (9)$$

коэффициента Онзагера L_{22} :

$$L_{22} = \frac{1}{3} C_{ev} v_F^2 \tau = \frac{\pi^2 n_e k^2 T_e}{3 m_e} \tau. \quad (10)$$

Здесь n_e — концентрация электронов, C_{ev} — их теплоемкость, а v_F^2 — квадрат скорости Ферми.

В формулы (8)–(10) входит время релаксации τ , о котором сама теория Друде ничего сказать не может. Часто используется выражение вида:

$$\tau = \frac{1}{aT_i + bT_e^2}, \quad (11)$$

где член aT_i описывает электрон-ионные столкновения, а bT_e^2 — электрон-электронные. В случае $aT_i \gg bT_e^2$ формула (11) сводится к $\tau \propto T_i^{-1}$.

Материалы второй главы опубликованы в работе [1].

В третьей главе рассматривалось влияние на получаемую $\sigma_{1\text{DC}}$ различных технических параметров: числа и способа выбора ионных конфигураций, числа атомов, уширения δ -функции в формуле Кубо-Гринвуда, числа \mathbf{k} -точек, псевдопотенциала, обменно-корреляционного функционала, энергии обрезания, числа зон. Основной анализ проводился для жидкого алюминия при $T = 1273$ К и $\rho = 2.249$ г/см³. Каждый параметр (или группа параметров) изменялся при фиксированных остальных параметрах; так оценивался диапазон, в котором может лежать значение $\sigma_{1\text{DC}}$. Этим способом была оценена погрешность расчета $\sigma_{1\text{DC}}$, связанная с недостаточно хорошей сходимостью по техническим параметрам. Погрешность составила +8%/–23% (наглядно изображена на рис. 1); максимальный вклад в нее (+1%/–15%) вносит зависимость $\sigma_{1\text{DC}}$ от числа атомов и числа \mathbf{k} -точек. Влияние числа атомов на $\sigma_{1\text{DC}}$ проиллюстрировано на рис. 1.

Результаты третьей главы опубликованы в рецензируемом издании [2].

В четвертой главе результаты КМД+КГ расчета для алюминия сравнивались с расчетами других авторов аналогичным методом, справочными и экспериментальными данными.

Результаты сравнения со справочными и экспериментальными данными по $\sigma_{1\text{DC}}$ приведены на рис. 1. Сравнение проводилось для жидкого алюминия при нормальном давлении и температурах $973 \div 1473$ К. Погрешность

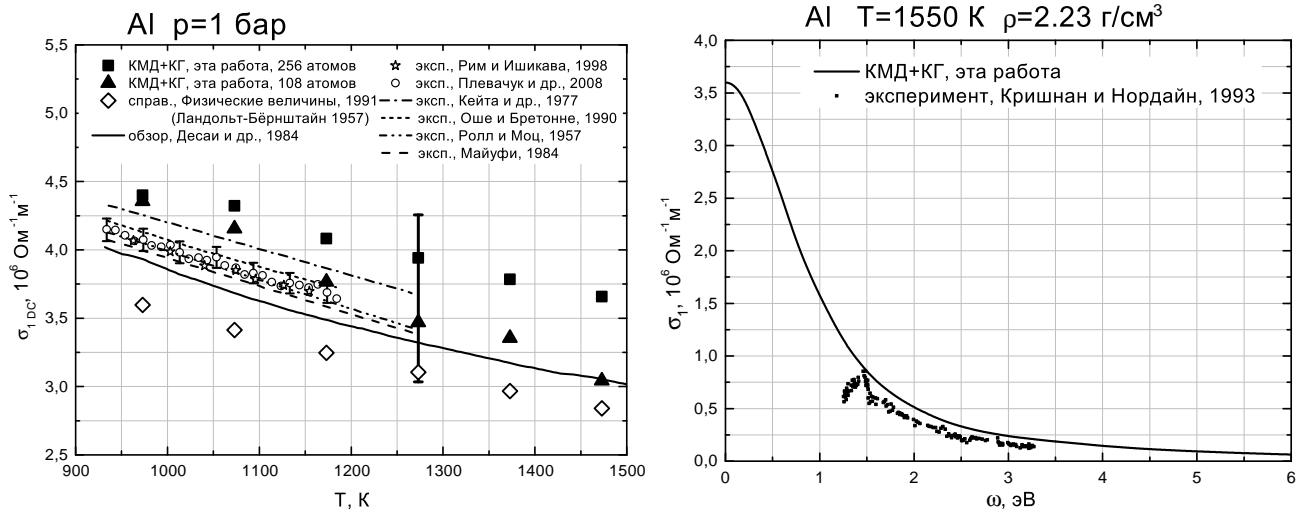


Рис. 1. Сравнение расчетных σ_{1DC} со справочными и экспериментальными данными.
 ■ — КМД+КГ расчет, 256 атомов; приведена оценка погрешности расчета. ▲ — КМД+КГ расчет, 108 атомов. ◇ — справочные данные (Физические величины, 1991). Сплошная линия — обзор (Десаи, 1984). Остальные маркеры и линии — отдельные эксперименты.

Рис. 2. Сравнение расчетной кривой $\sigma_1(\omega)$ с экспериментальными данными.
 Сплошная кривая — КМД+КГ расчет; • — эксперимент (Кришнан, 1993).

расчета составляет $+8\%/ -23\%$; максимальное отличие между справочными и экспериментальными зависимостями — 18% . На текущий момент итоговыми расчетными данными считаются результаты, полученные для 256 атомов. За «оптимальные» экспериментальные данные можно принять результаты (Плевачук, 2008). Тогда отличие между итоговыми расчетными данными и «оптимальным» экспериментом составляет 11% .

Результаты сравнения с экспериментальными данными по $\sigma_1(\omega)$ приведены на рис. 2. Сравнение проводилось для жидкого алюминия при $T = 1550$ К. КМД+КГ кривая $\sigma_1(\omega)$ имеет качественно друдевский вид. В отличие от эксперимента (Кришнан, 1993) на расчетной кривой не наблюдается пика при $\omega \approx 1.5$ эВ. В работе (Кришнан, 1993) отмечается, что пик на $\sigma_1(\omega)$ не наблюдается в некоторых других экспериментальных работах (Миллер, 1969). В диапазоне $1.5 \text{ эВ} \leq \omega \leq 3 \text{ эВ}$ присутствует качественное согласие КМД+КГ результатов с экспериментом. Расчетная кривая превышает экспериментальные значения в $1.3 \div 1.65$ раз.

Результаты четвертой главы опубликованы в рецензируемых изданиях [2, 3] и сборнике трудов конференции [4].

В пятой главе были рассчитаны переносные и оптические свойства алюминиевой плазмы при $\rho = 2.70 \text{ г/см}^3$ и $3 \text{ кК} \leq T_i \leq T_e \leq 20 \text{ кК}$.

Статическая электропроводность σ_{1DC} алюминия не зависит от T_e и убывает с ростом T_i (рис. 3а). Результаты КМД+КГ расчета с погрешностью не более 7% могут быть аппроксимированы (рис. 3а) эмпирической зависимо-

стью:

$$\sigma_{1\text{DC}} = \frac{A}{T_i^{0.25}}. \quad (12)$$

Коэффициент Онзагера L_{22} возрастает с ростом T_e и убывает с ростом T_i (рис. 3б). Результаты КМД+КГ расчета с погрешностью не более 5% могут быть аппроксимированы (рис. 3б) эмпирической зависимостью:

$$L_{22} = B \frac{T_e}{T_i^{0.25}}. \quad (13)$$

Теплопроводность K (на рисунке не показана), полученная в КМД+КГ расчете, отличается от L_{22} не более, чем на 10%. В рассматриваемых условиях основные качественные результаты по K совпадают с результатами по L_{22} .

Полученные КМД+КГ результаты по $\sigma_1(\omega)$ могут быть с погрешностью не более 13% аппроксимированы формулой Друде (8) с эмпирическими выражениями $\sigma_{1\text{DC}}(T_i) = A/T_i^{0.25}$ и $\tau(T_i) = C/T_i^{0.25}$. Численные значения A , B , C приведены в диссертации.

Результаты КМД+КГ расчета по $\sigma_{1\text{DC}}$ могут быть приближены формулой Друде (9) с использованием для времени релаксации выражения $\tau = C/T_i^{0.25}$, полученного при аппроксимации $\sigma_1(\omega)$. Если $n_e = \text{const}(T_i, T_e)$, $\tau \propto 1/T_i^{0.25}$, то $\sigma_{1\text{DC}} \propto 1/T_i^{0.25}$, что соответствует аппроксимации (12). Формула Друде (9) сведется точно к (12), если считать при расчете n_e , что на каждый ион приходится $Z = 3.23$ свободных электрона.

Результаты КМД+КГ расчета по L_{22} могут быть приближены формулой Друде (10) с тем же $\tau = C/T_i^{0.25}$. Из теории идеального ферми-газа $C_{ev} \propto T_e$, $v_F^2 = \text{const}$; $\tau \propto T_i^{0.25}$. Тогда $L_{22} \propto T_e/T_i^{0.25}$, что соответствует эмпирической аппроксимации (13). Формула Друде (10) сведется точно к (13) при $Z = 3.35$.

Значения Z , необходимые для того, чтобы формулы Друде (9)–(10) свелись точно к аппроксимациям (12)–(13), отличаются (до 12%) от физически понятного $Z = 3$. По мнению автора, причина этого заключается в погрешности КМД+КГ расчета. Формулы Друде с $Z = 3$ также качественно верно описывают КМД+КГ результаты по $\sigma_{1\text{DC}}$ и L_{22} ; количественное совпадение при этом хуже.

На рис. 3б также показаны результаты теории Друде (10) с τ вида (11). Коэффициенты a и b для алюминия взяты из работы (Анисимов, 2006): они обеспечивают получение экспериментальной K при $T_i = T_e = 1$ кК. При $T_i = T_e = 1$ кК КМД+КГ расчет и теория Друде с τ вида (11) дают близкие результаты (оценочно видно из рис. 3б).

В случае $3 \text{ кК} \leq T_i = T_e = T \leq 20 \text{ кК}$ справедливо $aT \gg bT^2$. Тогда формула Друде с τ вида (11) дает $L_{22} \propto T_e/T_i \propto T/T = \text{const}$ (рис. 3б), что не подтверждается КМД+КГ расчетом. Предложенное в этой работе выражение $\tau \propto 1/T_i^{0.25}$ дает хорошее совпадение с КМД+КГ расчетом; $L_{22} \propto T_e/T_i^{0.25} \propto$

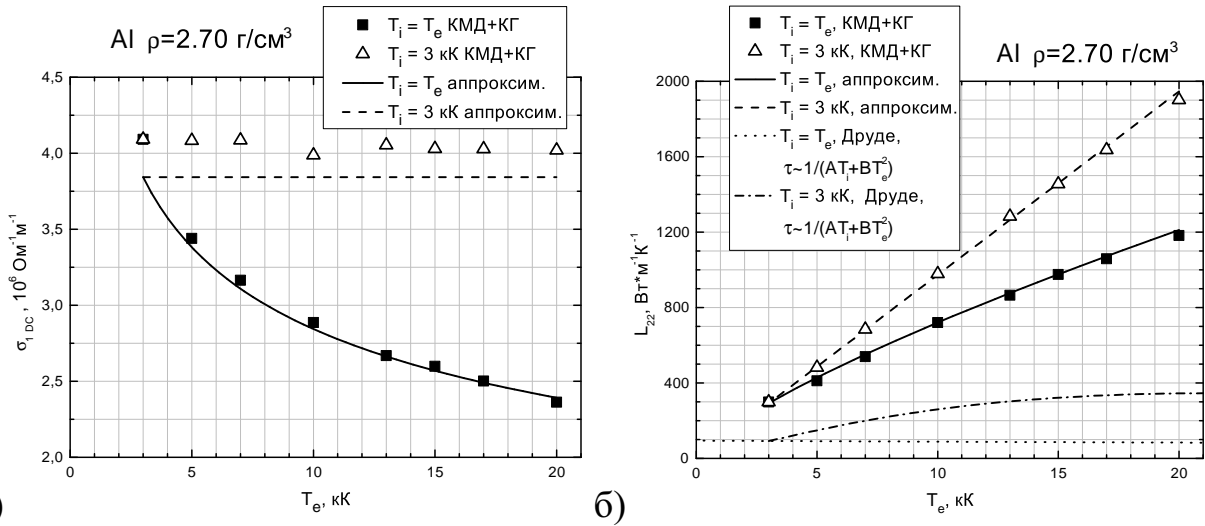


Рис. 3. Переносные свойства алюминиевой плазмы в двухтемпературном случае. (а) Зависимость σ_{1DC} от T_e . (б) Зависимость L_{22} от T_e .

■ — КМД+КГ расчет, равновесный случай $T_e = T_i$. Δ — КМД+КГ расчет, неравновесный случай $T_i = 3$ кК. *Сплошная линия* — аппроксимация (12)–(13), равновесный случай $T_e = T_i$; *штриховая линия* — аппроксимация (12)–(13), неравновесный случай $T_i = 3$ кК. *Пунктирная линия* — формула Друде (10) с τ вида (11), равновесный случай $T_i = T_e$; *штрихпунктирная линия* — формула Друде (10) с τ вида (11), неравновесный случай $T_i = 3$ кК.

$T/T^{0.25} \propto T^{0.75}$ — наблюдается увеличение L_{22} с ростом T . Формула Друде с τ вида (11) дает постоянное поведение L_{22} , формула Друде с $\tau \propto T_i^{-0.25}$ (и КМД+КГ расчет) — существенный рост, поэтому уже при $T = 3$ кК между ними есть существенное различие.

В случае $T_i = \text{const} = 3$ кК теория Друде с τ вида (11) дает $L_{22} \propto T_e / (\text{const} + T_e^2) \propto T_e$. Результаты КМД+КГ расчета также дают поведение $L_{22} \propto T_e$. Однако при $T_i = T_e = 3$ кК значения существенно отличаются. Поэтому и наклон зависимости для теории Друде с τ вида (11) значительно меньше, чем у КМД+КГ расчета (рис. 3б).

Выражение $\tau = C/T_i^{0.25}$, при подстановке которого в формулы Друде (8)–(10) аппроксимируются КМД+КГ результаты, является эмпирическим. В принципе, для τ может быть предложено и другое выражение, однако оно с ростом T_i должно убывать значительно медленнее, чем $\tau \propto T_i^{-1}$ (получаемое из (11)). В этом состоит существенный результат пятой главы.

Результаты пятой главы опубликованы в рецензируемом издании [1] и в сборнике трудов конференции [5].

В шестой главе были рассчитаны термодинамические, переносные и оптические свойства плазмы эффективного состава CH_2 при $\rho = 0.954$ г/см³ и 5 кК $\leq T \leq 100$ кК.

При $T = 5$ кК кривая $\sigma_1(\omega)$ имеет недрудевский вид с заметным пиком при $\omega \approx 10$ эВ (рисунок не представлен). Пик становится шире при более высоких температурах.

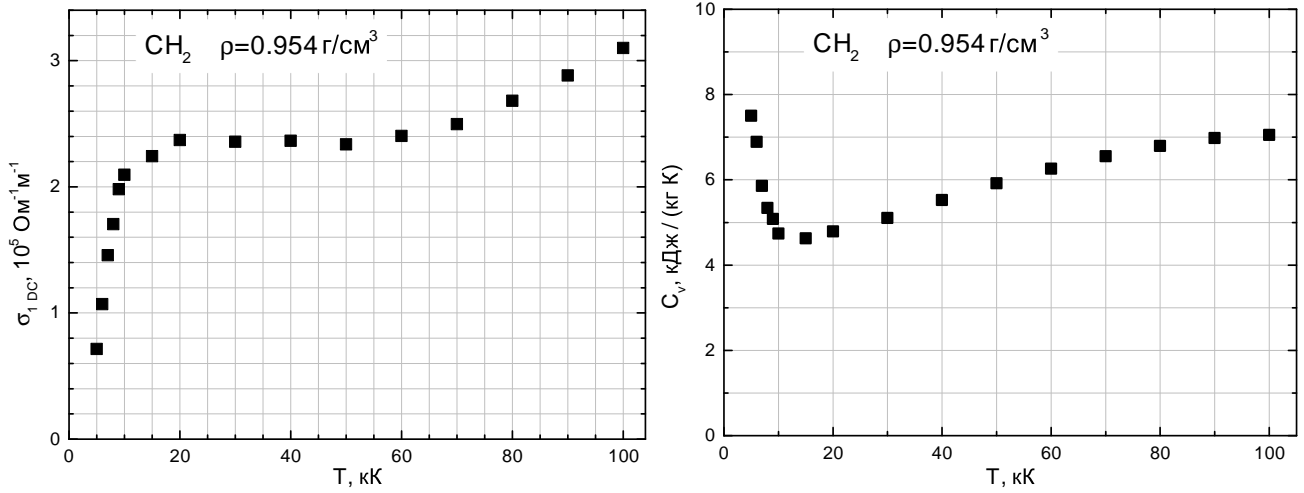


Рис. 4. Ступенчатая зависимость статической электропроводности плазмы эффективного состава CH_2 от температуры.

Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости плазмы эффективного состава CH_2 .

Другим заметным результатом является ступенчатая зависимость статической электропроводности $\sigma_{1\text{DC}}(T)$ от температуры: $\sigma_{1\text{DC}}$ резко возрастает при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$ и остается практически постоянной при $20 \text{ кК} \leq T \leq 60 \text{ кК}$ (рис. 4). Резкий рост $\sigma_{1\text{DC}}$ при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$ сопровождается убыванием теплоемкости при постоянном объеме C_v (рис. 5).

При $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$ происходит процесс, приводящий к увеличению электропроводности и 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.

Резкий рост электропроводности можно объяснить, проанализировав плотность электронных состояний (ПЭС) $g(\epsilon)$ (рис. 6). Формулу Кубо-Гринвуда (4) можно представить в следующем непрерывном виде (Коллинс, 2001):

$$\sigma_1(\omega) \propto \int |\nabla(\epsilon, \epsilon + \hbar\omega)|^2 \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \hbar\omega)}{\hbar\omega} g(\epsilon)g(\epsilon + \hbar\omega) d\epsilon. \quad (14)$$

Здесь $|\nabla(\epsilon_1, \epsilon_2)|^2$ — непрерывная форма матричных элементов оператора скорости. При $\omega \rightarrow 0$ формула (14) принимает вид:

$$\sigma_{1\text{DC}} \propto \int |\nabla(\epsilon, \epsilon)|^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon) \right) g^2(\epsilon) d\epsilon. \quad (15)$$

Следствия из (15): 1) чем больше $g(\epsilon)$, тем больше вклад данного ϵ в $\sigma_{1\text{DC}}$; 2) функция $-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon)$ имеет вид колокола, поэтому существенный вклад в $\sigma_{1\text{DC}}$ дают ϵ , лежащие внутри ширины кривой $-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon)$ (заштриховано на рис. 6). На рис. 6 энергия электронов ϵ отсчитывается от химического потенциала μ .

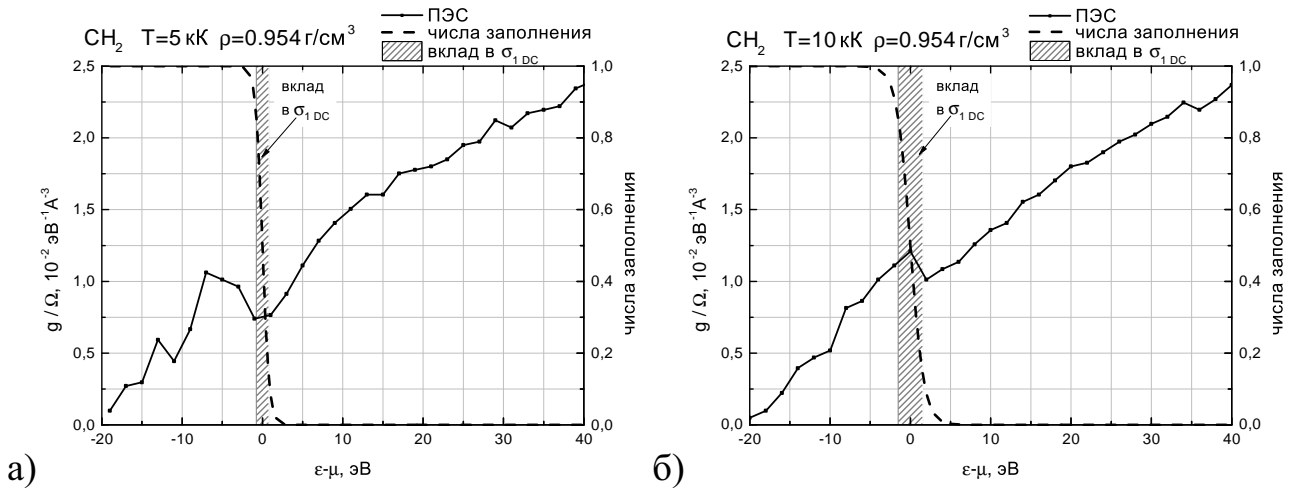


Рис. 6. Объяснение быстрого роста σ_{1DC} при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$. (а) $T = 5 \text{ кК}$. (б) $T = 10 \text{ кК}$. Сплошная линия — $g(\epsilon - \mu)/\Omega$ (Ω — объем суперячейки). Штриховая линия — числа заполнения (распределение Ферми). Штриховка — максимальный вклад в σ_{1DC} (ширина кривой $-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}(\epsilon - \mu)$).

При $T = 5 \text{ кК}$ (рис. 6а) на кривой $g(\epsilon - \mu)$ присутствует провал. Область энергий, дающих существенный вклад в σ_{1DC} , приходится именно на этот провал, поэтому электропроводность при $T = 5 \text{ кК}$ низкая.

При $T = 10 \text{ кК}$ (рис. 6б) область энергий, дающих максимальный вклад в σ_{1DC} , приходится на большие значения $g(\epsilon - \mu)$, чем при $T = 5 \text{ кК}$; поэтому электропроводность при 10 кК выше, чем при 5 кК .

Результаты шестой главы опубликованы в рецензируемом издании [6] и 3 сборниках тезисов [7].

В заключении кратко излагаются основные полученные результаты.

1. Для жидкого алюминия при $T = 1273 \text{ К}$ и $\rho = 2.249 \text{ г/см}^3$ была исследована зависимость результатов расчета σ_{1DC} от технических параметров. Погрешность расчета σ_{1DC} была оценена в $+8\%/-23\%$.
2. Для алюминия было произведено сравнение результатов расчета со справочными, экспериментальными данными и расчетами других авторов аналогичным методом.
3. Был произведен расчет переносных и оптических свойств алюминиевой плазмы при $\rho = 2.70 \text{ г/см}^3$ и $3 \text{ кК} \leq T_i \leq T_e \leq 20 \text{ кК}$. Построена эмпирическая аппроксимация рассчитанных свойств: $\sigma_{1DC} \propto 1/T_i^{0.25}$, $L_{22} \propto T_e/T_i^{0.25}$. Рассчитанные свойства могут быть также описаны теорией Друде со временем релаксации вида $\tau \propto T_i^{-0.25}$.
4. Рассчитаны термодинамические, переносные и оптические свойства плазмы эффективного состава CH_2 при $\rho = 0.954 \text{ г/см}^3$ и $5 \text{ кК} \leq T \leq 100 \text{ кК}$. Получен быстрый рост σ_{1DC} при $5 \text{ кК} \leq T \leq 10 \text{ кК}$. Он объясняется ростом плотности электронных состояний при энергии электронов ϵ , равной химическому потенциалу μ .

Результаты работы опубликованы в 4 статьях в рецензируемых изданиях из перечня ВАК [1–3, 6], 2 статьях в сборниках трудов конференций [4, 5] и 23 тезисах докладов [7].

СПИСОК ОСНОВНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* Transport and optical properties of warm dense aluminum in the two-temperature regime: *Ab initio* calculation and semiempirical approximation // *Phys. Plasmas*. 2014. Vol. 21. P. 073302.
2. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* *Ab initio* calculation of transport and optical properties of aluminum: Influence of simulation parameters // *Comput. Mater. Sci.* 2013. Vol. 79. P. 817–829.
3. *Povarnitsyn M. E., Knyazev D. V., Levashov P. R.* *Ab initio* simulation of complex dielectric function for dense aluminum plasma // *Contrib. Plasma Phys.* 2012. Vol. 52, no. 2. P. 145–148.
4. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* *Ab initio* calculation of static and dynamic conductivity of aluminum // *Physics of Extreme States of Matter – 2012* / Ed. by V. E. Fortov et al. Chernogolovka: IPCP RAS, 2012. P. 12–14.
5. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* Transport properties of aluminum in the two-temperature regime // *Physics of Extreme States of Matter – 2014* / Ed. by V. E. Fortov et al. Moscow: Publishing Group “Granica”, 2014. P. 12–15.
6. *Knyazev D. V., Levashov P. R.* *Ab initio* calculation of thermodynamic, transport, and optical properties of CH₂ plastics // *Phys. Plasmas*. 2015. Vol. 22. P. 053303.
7. *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* / Ed. by V. E. Fortov et al. Nalchik: KBSU, 2015. P. 160–161.

Князев Дмитрий Владимирович

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И
ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ
МЕТОДА КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И
ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА

Автореферат

| | | |
|----------------------------------|----------------|------------------|
| Подписано в печать 10.09.2015 г. | | Формат 60x84/16 |
| Печать офсетная | Уч.-изд.л. 1,0 | Усл.-печ.л. 0,93 |
| Тираж 100 экз. | Заказ 187 | Бесплатно |

ОИВТ РАН. 125412, Москва, Ижорская ул., 13, стр. 2