

Международная конференция  
«Забабахинские научные чтения — 2019»

Применение псевдоатомной молекулярной  
динамики к исследованию транспортных  
свойств сильнонеидеальной плотной плазмы

А. Л. ФАЛЬКОВ\*, А. А. ОВЕЧКИН и П. А. ЛОБОДА

ФГУП РФЯЦ-ВНИИТФ им. акад. Е. И. ЗАБАБАХИНА  
(456770, Россия, г. Снежинск Челябинской области, а/я 245);  
НИЯУ МИФИ

(115409, Россия, г. Москва, Каширское ш., д. 31)

Снежинск — 2019

# Содержание

Модели TFIS/TFSC и ПАМД  
Эффективный потенциал межи-  
онного взаимодействия  $V_{II}(r_{ij})$   
Псевдоатомная классическая мо-  
лекулярная динамика  
Ионная самодиффузия  
Ионная сдвиговая вязкость  
Результаты  
Выводы



# Модели TFIS/TFSC (C. E. Starrett & D. Saumon)

Электронные подзадачи:

полная ( $Z \neq 0$ , I) и «внешняя» ( $Z \equiv 0$ , II):

$$\text{I. } \begin{cases} n_e(r) = C_{TF} I_{1/2} \left( \beta \left( \mu_e - V_{Ne}^{eff}(r) \right) \right), \quad \beta = 1/T, \quad C_{TF} = \text{const}, \\ V_{Ne}^{eff}(r) = \boxed{-\frac{Z}{r}} + \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_e(r') - n_e^0 g(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{Ie}^{e,c}[n_I(r)] + \dots \end{cases}$$

$$\text{II. } \begin{cases} n_e^{ext}(r) = C_{TF} I_{1/2} \left( \beta \left( \mu_e - V_e^{eff,ext}(r) \right) \right), \\ V_e^{eff,ext}(r) = \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_e^{ext}(r') - n_e^0 g(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + V_{Ie}^{e,c}[n_I(r)] + \dots \end{cases}$$

$$V_{Ie}^{e,c}[n_I(r)] = - \left( \frac{Z^\star}{\bar{Z}} \right) \frac{n_I^0}{\beta} \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \widetilde{c}_{Ie}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \overline{n_e^0}) (g(r') - 1).$$

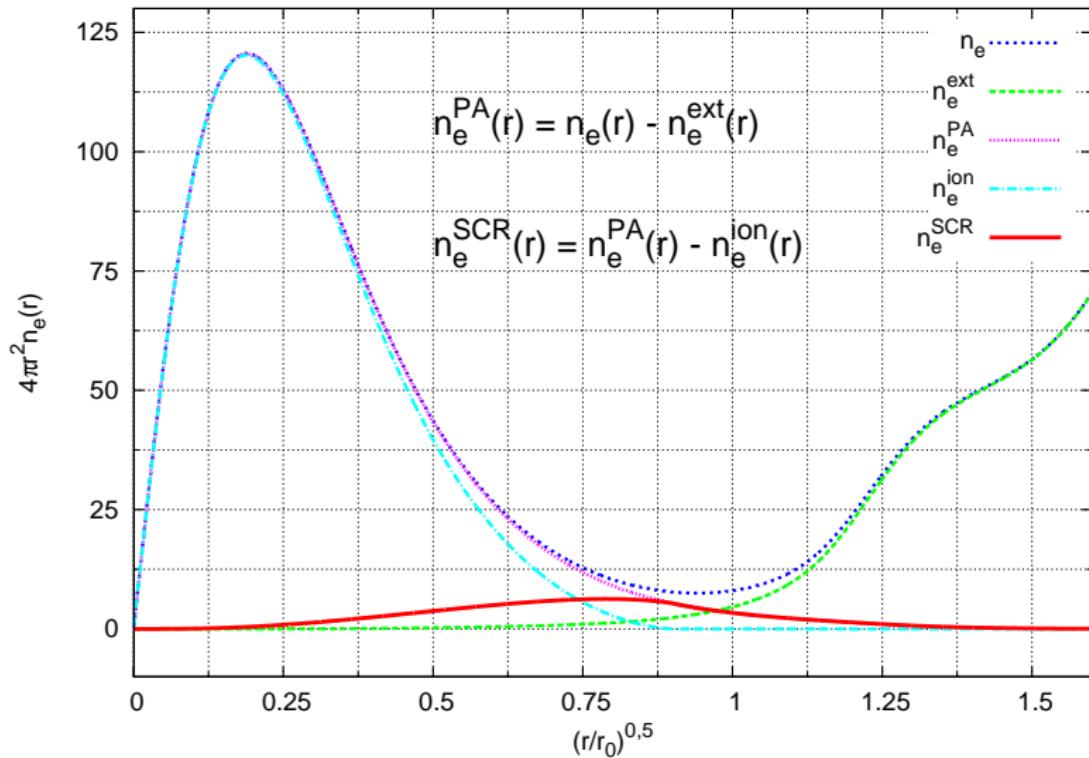
$$n_I^{(0)}(r) \equiv n_I^0 \Theta(r - r_0^I), \quad \text{TFIS: } n_I(r) = n_I^{(\text{first it.})}(r), \quad \text{TFCS: } n_I(r) \equiv n_I^0 g(r)$$

Ионная подзадача — ур-ия Орнштейна-Цернике или ПАМД:

$$\text{III. ОИЦ: } \begin{cases} h(k) = c(k) + n_I^0 c(k) h(k), \quad E(r) — \text{замыкание уравнений ОЦ,} \\ g(r) \equiv 1 + h(r) = \exp \left( \boxed{-\beta V_{II}(r)} + h(r) - c(r) + E(r) \right); \end{cases}$$

# Экранирующая электронная плотность $n_e^{SCR}(r)$

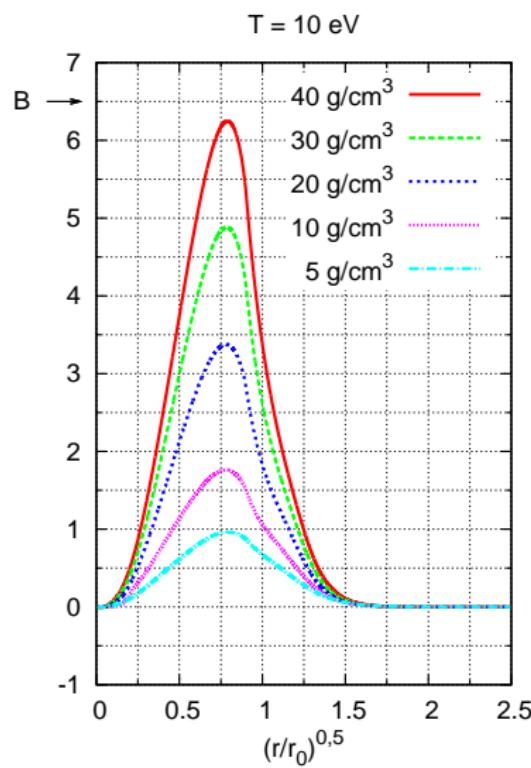
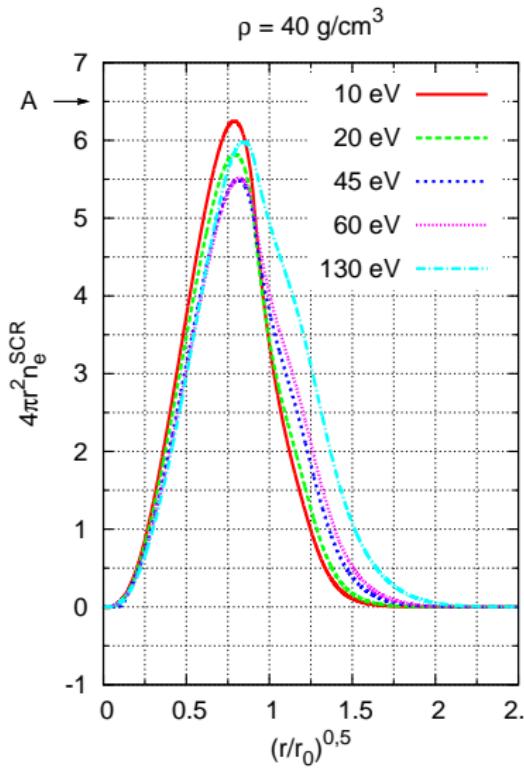
Взаимозависимости между электронными плотностями  $n_e$ ,  $n_e^{\text{ext}}$ ,  $n_e^{\text{PA}}$ ,  $n_e^{\text{ion}}$  и  $n_e^{\text{SCR}}$



↑  $n_e^{\text{ion}}(r)$  — D. Ofer, E. Nardi, and Y. Rosenfeld. Phys. Rev. A 38, 5801 (1988).

Расчёт по модели TFSC для плазмы W,  $\rho = 40 \text{ г/см}^3$ ,  $T = 10 \text{ эВ}$ .

# Экранирующая электронная плотность $n_e^{SCR}(r)$ : зависимость от температуры и плотности для плазмы вольфрама



# Эффективный ион-ионный потенциал $V_{II}(k)$

для решения ионной подзадачи в TFIS/TFSC или ПАМД

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_{ee}^0(k), \\ c_{ee}(k), \\ n_e^{SCR}(k) \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Описание ионных корреляций} \leftarrow \beta V_{II}(r); \\ \boxed{\beta V_{II}(k) = \frac{4\pi\beta}{k^2} \bar{Z}^2 - c_{Ie}\left(k, \overline{n_e^0}\right) n_e^{SCR}(k)}; \\ c_{Ie}\left(k, \overline{n_e^0}\right) = -\beta n_e^{SCR}(k)/\chi_e(k); \\ \chi_e(k) \equiv \chi_{ee}^0(k)/(1 + \chi_{ee}^0(k)c_{ee}(k)/\beta). \end{array} \right.$$

$$\boxed{\chi_{ee}^0(k), c_{ee}(k) \rightarrow \chi_e(k), n_e^{SCR}(k) \rightarrow c_{Ie}(k) \rightarrow V_{II}(k)}$$

$$c_{ee}(k) = -4\pi\beta(1 - G_{ee}(k))/k^2 \leftarrow (\text{«Атом в желе»} + \text{ЛПК});$$

$$\boxed{n_e^{SCR}(r) \equiv n_e^{\text{PA}} - n_e^{\text{ion}}, \quad n_e^{\text{PA}}(r) \equiv n_e - n_e^{\text{ext}}} \quad \bar{Z} = \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_e^{SCR}$$

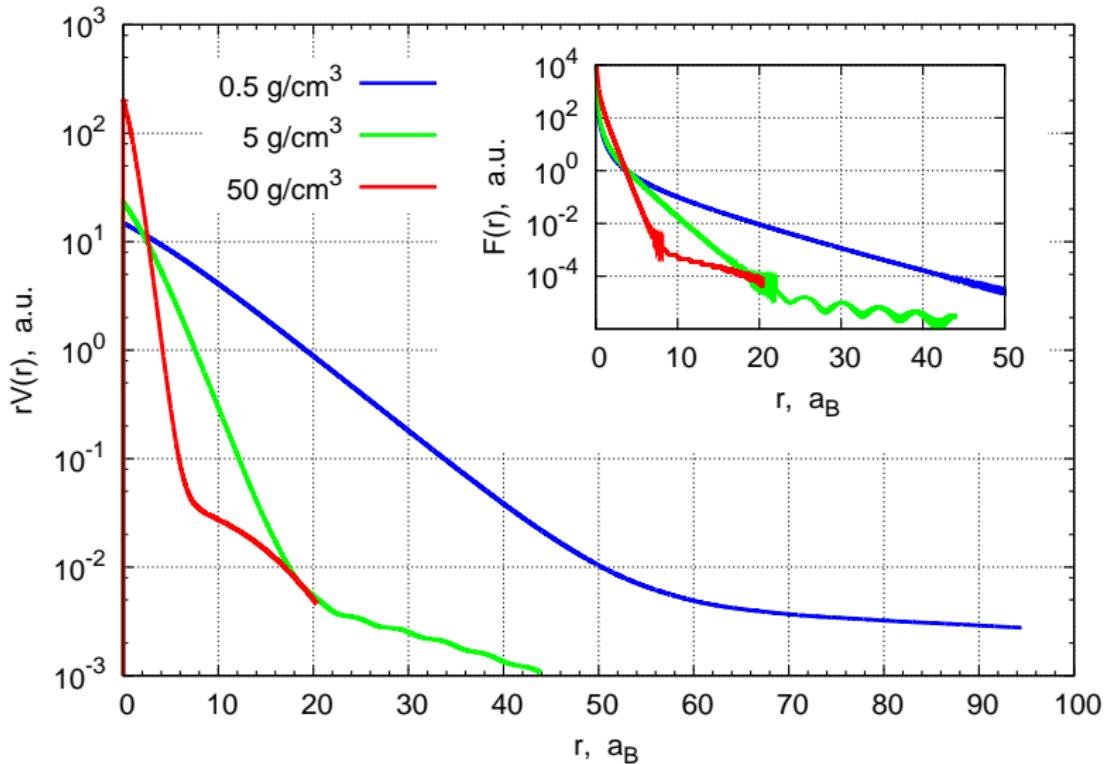
$$\boxed{n_e(\mathbf{r}) \equiv \sum_{j=1}^{N_{tot} \rightarrow \infty} n_e^{PA}(|\mathbf{R}_j - \mathbf{r}|)} - \text{суперпозиционное приближение.}$$

↑  $\chi_{ee}^0(k)$  — функция Линдхарда.

↑  $n_e^{\text{ion}}(r)$  — D. Ofer, E. Nardi, and Y. Rosenfeld. Phys. Rev. A 38, 5801 (1988).

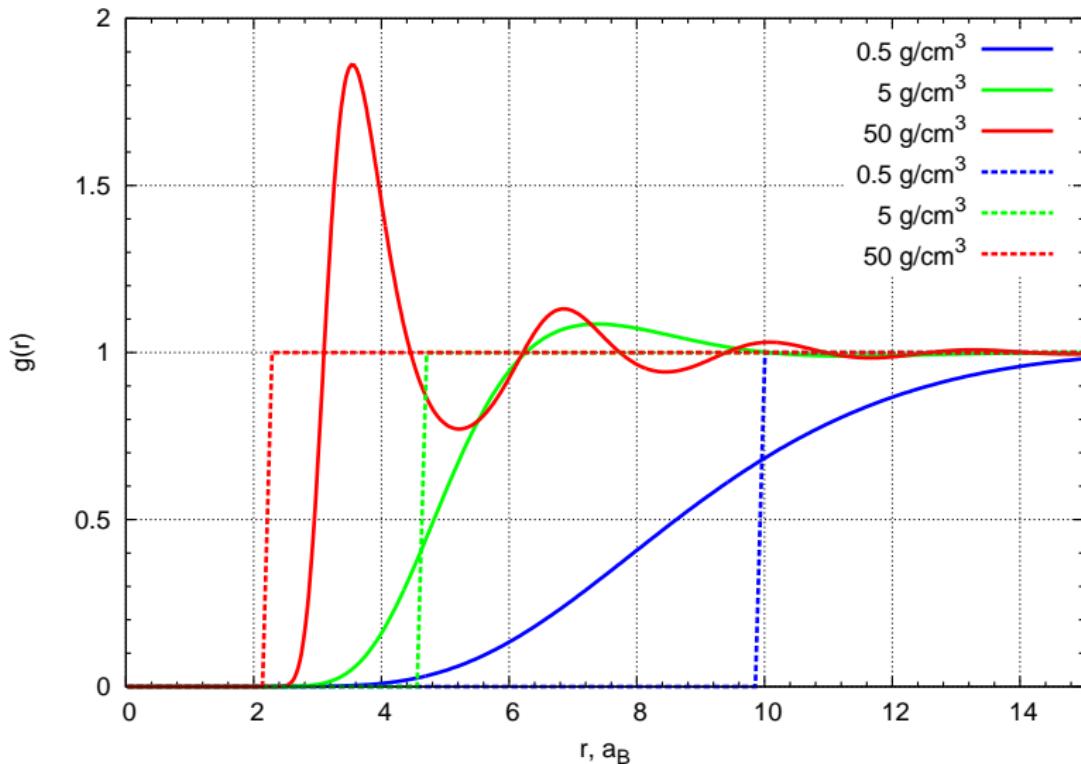
↑  $G_{ee}(k)$ , ЛПК — S. Ichimaru and K. Utsumi. Phys. Rev. B 24, 7385 (1981).

# Эффективный ион-ионный потенциал $rV_{II}(r_{ij})$ и поле сил парного взаимодействия $F(r_{ij})$ между псевдоатомами



Расчёты по модели TFIS для плазмы W,  $T = 10$  эВ,  $\rho \in [0,5; 5; 50]$  г/см<sup>3</sup>.

# Зависимость ионных РФР $g(r)$ от потенциала $V_{II}(r)$



Расчёты по модели TFSC для плазмы W,  $T = 10 \text{ эВ}$ ,  $\rho \in [0.5; 5; 50] \text{ г/см}^3$ .

# Псевдоатомная молекулярная динамика

ПАМД – классическая МД + потенциальная энергия  $V_{II}$  из TFIS/TFSC

- ▶ Для моделирования необходимо знать  $V_{II}(r)$ ,  $T$ ,  $\rho$ ,  $A$ ,  $Z$ ;

$$\boxed{\forall i \leq N_{tot} \Rightarrow m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \mathbf{F}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) - \gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \mathbf{L}_i(t),}$$

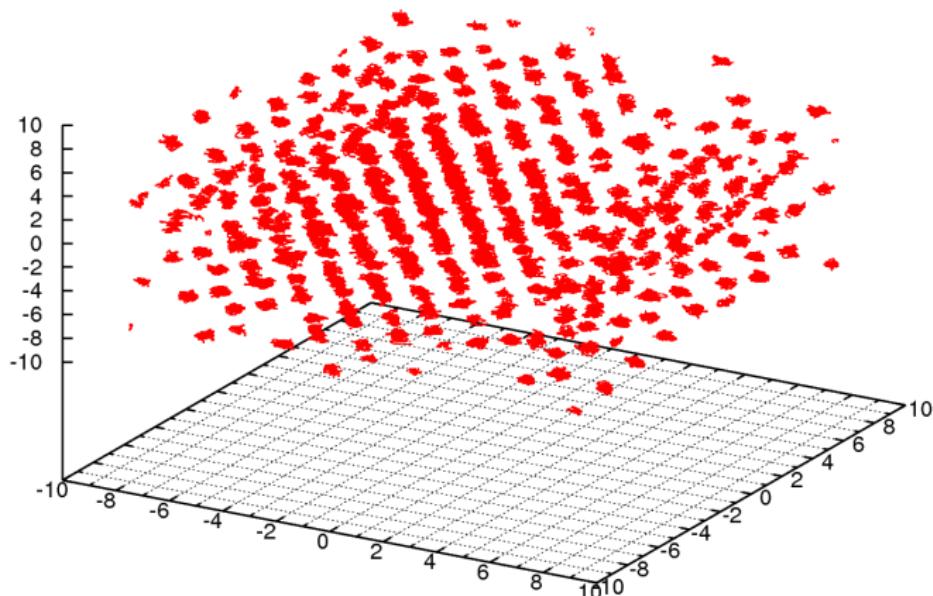
- ▶ интегрирование уравнений движения:  
схема с «дробными шагами» (1-ого порядка точности);
- ▶  $N_{tot}$ :  $\sim 10^3$  – расчёт структур и коэффициента самодиффузии,  $\sim 10^4$  – расчёт термодинамики и вязкости;
- ▶ ячейка с периодическими граничными условиями;
- ▶ параллельный программный код ELEGIA-PALMA;
- ▶  $m_i \equiv 1$ ,  $\gamma = \text{const}$  – эффективная сила трения;
- ▶  $\mathbf{L}_i$  – случайные силы Ланжевена («тепловой шум»),  
 $\langle \mathbf{L}(\mathbf{t})_i \rangle = 0$ ;  $\langle \mathbf{L}_i(t) \mathbf{L}_i(t + \tau) \rangle \sim \delta(\tau)$ .

D. C. Rapaport. The Art of Molecular Dynamic Simulation. — Cambridge Univ. Press, 2-nd ed., 2004.

C. E. Starrett and D. Saumon. Phys. Rev. E 93, 063206 (2016).

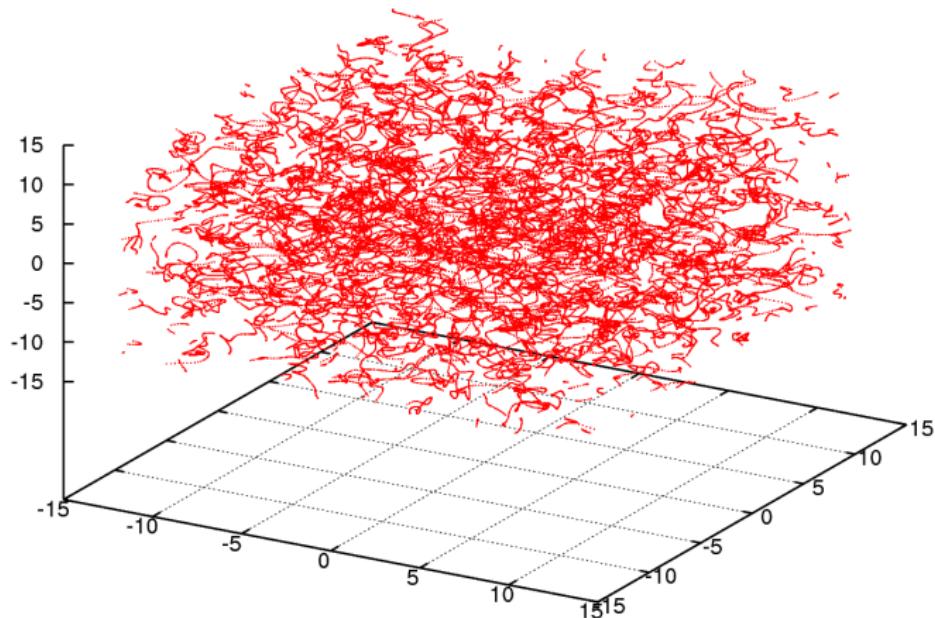
# Примеры траекторий псевдоатомов

## Система в начале расчёта. Плавление ОЦК-решётки



## Примеры траекторий псевдоатомов

## Система в расплавленном состоянии. Изотропная жидккая фаза



# Ионный коэффициент самодиффузии $D^{R,V}$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho, \quad \rho \mathbf{U} = -D \nabla \rho,$$

Формула Эйнштейна-Смолуховского:

$$D^R = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6N_m t} \left\langle \sum_j^{N_m} [\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_j(0)]^2 \right\rangle,$$

Формула Кубо-Грина<sup>1)</sup>:

$$D^V = \frac{1}{3N_m} \int_0^{+\infty} dt \left\langle \sum_{j=1}^{N_m} (\mathbf{v}_j(t), \mathbf{v}_j(0)) \right\rangle.$$

D. C. Rapaport. The Art of Molecular Dynamic Simulation. — Cambridge Univ. Press, 2-nd ed., 2004.

<sup>1)</sup> Интегрирование автокорреляционной функции скорости.

## Ионная сдвиговая вязкость $\eta$

$$\rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{U} \nabla \right) \mathbf{U} - \eta \nabla^2 \mathbf{U} - \left( \frac{\eta}{3} + \eta_v \right) \nabla (\nabla \mathbf{U}) = -\nabla p,$$

$$\eta = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6TVt} \left\langle \sum_{x < y} \left[ \sum_j m_j r_{jx}(t) v_{jy}(t) - \sum_j m_j r_{jx}(0) v_{jy}(0) \right] \right\rangle,$$

Расчёт  $\eta$  основан на интегрировании автокорреляционной функции тензора давления (формула Кубо-Грина):

$$\eta = \frac{V}{3T} \int_0^{+\infty} dt \left\langle \sum_{x < y} P_{xy}(t) P_{xy}(0) \right\rangle,$$

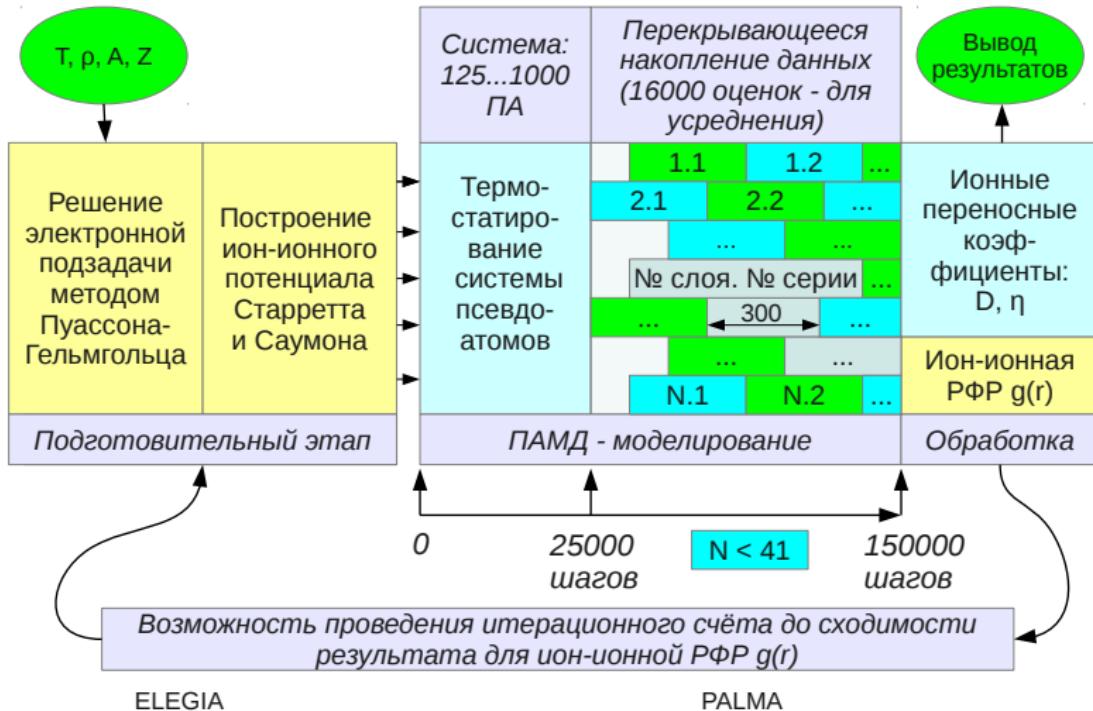
$$P_{xy} \equiv \frac{1}{V} \sum_j \left[ m_j v_{jx} v_{jy} + \sum_{i \neq j} r_{ijx} F_{ijy} + (\mathbf{r}_j \mathbf{F}_j) \right], \quad F_{ij\alpha} = (\mathbf{F}(r_{ij}))_\alpha.$$

D. C. Rapaport. The Art of Molecular Dynamic Simulation. — Cambridge Univ. Press, 2-nd ed., 2004.

C. A. Croxton. Liquid State Physics — A Statistical Mechanical Introduction. — Cambridge Univ. Press, 1974.

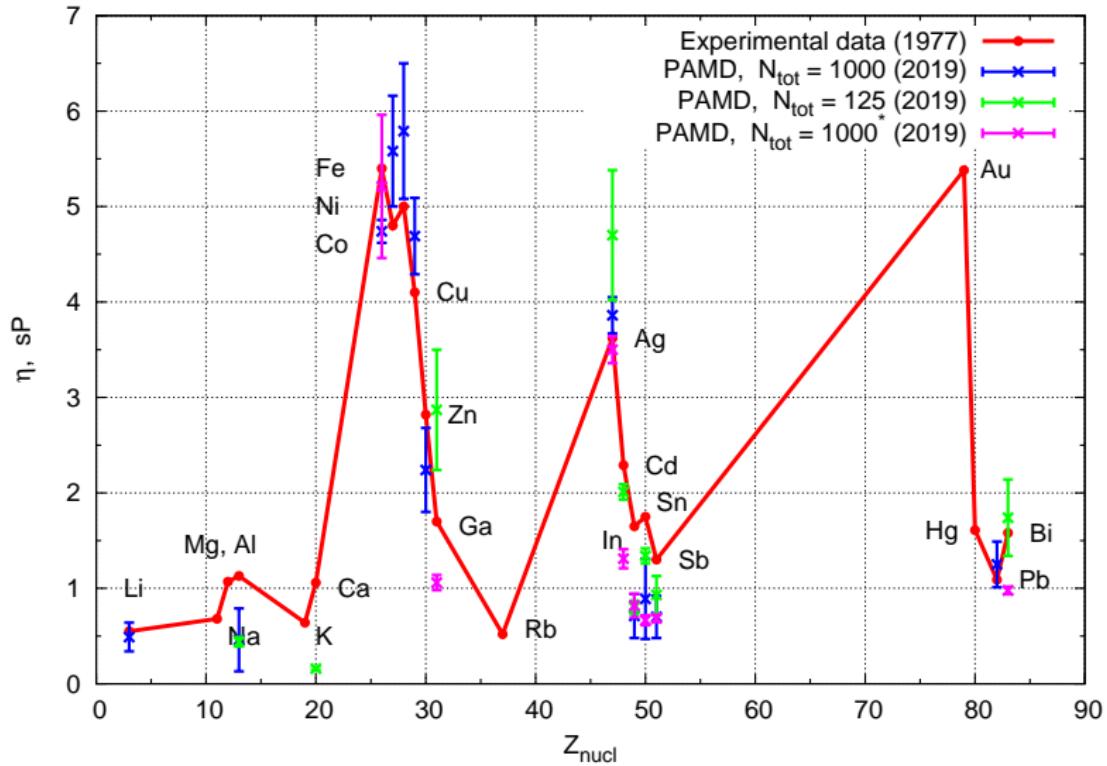


# Схема организации счёта в программном комплексе ELEGIA-PALMA



С целью улучшения статистики для каждой точки  $(T, \rho)$  производится  $5 \div 50$  независимых расчётов.

# Коэффициент сдвиговой вязкости $\eta$ для расплавов чистых металлов при $T = T_{\text{пл.}} + 50 \text{ K}$



Эксперимент: П. П. Арсентьев, Л. А. Коледов. Металлические расплавы и их свойства. — М.: «Металлургия», 1976. — 376 с.

# Коэффициент сдвиговой вязкости $\eta$

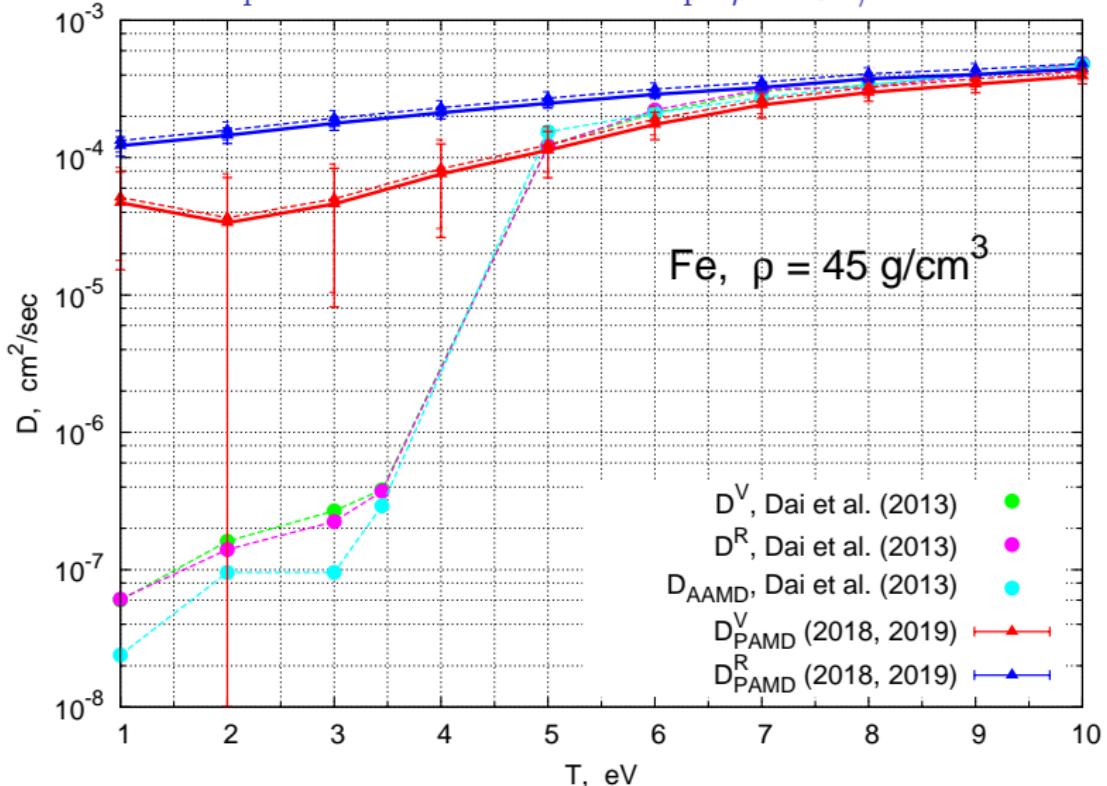
для расплавов чистых металлов при  $T = T_{\text{пл.}} + 50$  К

Элемент	$\eta^{(\text{эксп.})}$ , сП	$\eta^{(\text{ПАМД})}$ , сП	$\delta, \%$	$T, ^\circ\text{C}$	$\bar{\rho}, \text{г}/\text{см}^3$
Li <sub>3</sub>	0,55	$0,49 \pm 0,15$	-11	504	0,512
Fe <sub>26</sub>	5,40	$4,74 \pm 0,12$	-12	1585	6,999
Co <sub>27</sub>	4,80	$5,58 \pm 0,58$	+16	1545	7,764
Ni <sub>28</sub>	5,00	$5,79 \pm 0,71$	+16	1503	7,830
Cu <sub>29</sub>	4,10	$4,69 \pm 0,40$	+14	1134	7,870
Zn <sub>30</sub>	2,82	$2,24 \pm 0,44$	-21	470	6,430
Ag <sub>47</sub>	3,62	$3,86 \pm 0,29$	+7	1012	9,242
Pb <sub>82</sub>	1,09	$1,25 \pm 0,19$	+15	378	10,605

Эксперимент и формулы для определения плотности металлического расплава:  
 П. П. Арсентьев, Л. А. Коледов. Металлические расплавы и их свойства. —  
 М.: «Металлургия», 1976. — 376 с.

Расчёт: методика ПАМД, программный комплекс ELEGIA-PALMA;  $1,3 \cdot 10^4$  точек на ячейку — сетка в электронной подзадаче;  $R_{\text{end}} = 50 r_0^I$ ; фурье-преобразование по методу Филона, 4096 точек — сетка в ионной подзадаче;  $N_{\text{tot}} = 10^3$  — полное число ПА;  $R_{\text{cut}} = 14 \text{ а}_B$  — «радиус обрезания» взаимодействий между ПА;  $N_m = 1,5 \cdot 10^5$  — количество шагов по времени,  $\Delta t = 5 \cdot 10^{-3}$  i.u. — шаг по времени в ионных единицах; 40 слоёв по времени;  $\alpha = 0,95$  — доверительная вероятность (статистическая обработка данных по методу Стьюдента).

Коэффициент ионной самодифузии  $D^{R,V}$   
в сверхплотной плазме железа при  $\rho = 45 \text{ г}/\text{см}^3$



$\Gamma_{II} = 230 \div 460$ , ELEGIA-PALMA:  $N_m = 125$ .

$D^V, D^R, D_{AAMD}$  — J. Dai, Y. Hou, D. Kang et al. arXiv:1303.3361v1 [astro-ph.EP],  
pp. 1–15 (2013).

## Выводы

1. Показано хорошее согласие расчётного коэффициента сдвиговой вязкости  $\eta^{\text{ПАМД}}$  с экспериментальными результатами для металлических расплавов при нормальном давлении и  $T = T_{\text{пл.}} + 50^\circ\text{C}$ .
2. Отмечен быстрый (на порядок) рост коэффициентов самодиффузии  $D^{R,V}$  при незначительном увеличении температуры плазмы. Для жидкой фазы получено согласие с результатами расчётов по молекулярно-динамическим методикам AAMD (с квазиклассическим описанием электронной подсистемы плазмы) и QLMD (квантовая молекулярная динамика).
3. В программе ELEGIA-PALMA реализован способ снижения дисперсии расчётных результатов для коэффициентов  $D^{R,V}$  и  $\eta^{\text{ПАМД}}$ . Для коэффициента  $\eta^{\text{ПАМД}}$  отмечена существенно более медленная сходимость с ростом  $N_m$ , чем для  $D^{R,V}$ .

# «Ионная» система единиц измерения (LMT)

Единица длины  $L$ :

$$L \text{ [см]} \equiv a_B \text{ [см]}.$$

Единица массы  $M$ :

$$M \text{ [г]} \equiv A \text{ [а.е.м.]} \cdot 1 \text{ а.е.м./г.}$$

Единица температуры  $T$ :

$$T \text{ [эрг]} = \text{На} \cdot 1 \text{ эВ} / \text{На} \cdot 1 \text{ эрг/эВ.}$$

Коэффициент ионной самодиффузии  $D$ :

$$D_{\text{i.u.}} = a_B \text{ [см]} \left( \frac{3}{2\beta} \frac{\text{На} \text{ [эрг]}}{M \text{ [г]}} \right)^{1/2}, \quad [D_{\text{i.u.}}] = \frac{\text{см}^2}{\text{с}}.$$

Коэффициент ионной сдвиговой вязкости  $\eta$ :

$$\eta_{\text{i.u.}} = \frac{10^2}{(a_B \text{ [см]})^2} \left( \frac{3}{2\beta} \cdot \text{На} \text{ [эрг]} \cdot M \text{ [г]} \right)^{1/2}, \quad [\eta_{\text{i.u.}}] = \text{мПа}\cdot\text{с} \equiv \text{сП.}$$