

<u>ИПМ им.М.В.Келдыша РАН</u> • <u>Электронная библиотека</u> <u>Препринты ИПМ</u> • <u>Препринт № 66 за 2018 г.</u>



ISSN 2071-2898 (Print) ISSN 2071-2901 (Online)

Алексашкина А.А., Демин М.М., Мажукин В.И.

Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств меди в окрестности точки плавления

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Алексашкина А.А., Демин М.М., Мажукин В.И. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств меди в окрестности точки плавления // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2018. № 66. 18 с. doi:10.20948/prepr-2018-66

URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2018-66

Ордена Ленина ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ имени М.В.Келдыша Российской академии наук

А.А. Алексашкина, М.М. Демин, В.И. Мажукин

Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств меди в окрестности точки плавления

Алексашкина А.А., Демин М.М., Мажукин В.И.

Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств меди в окрестности точки плавления

Метод молекулярной динамики используется для расчета термодинамических свойств меди: зависимости от давления температуры и теплоты плавления и зависимости от температуры теплоемкости, коэффициента линейного расширения и плотности. Проводится сравнение полученных зависимостей с экспериментом. Найденные зависимости могут быть далее использованы как входные данные континуальной модели импульсного лазерного нагрева вещества.

Ключевые слова: молекулярная динамика, медь, ЕАМ потенциал

Aleksashkina A.A., Demin M.M., Mazhukin V.I.

Molecular dynamic modeling of thermophysical properties of copper in the region of the melting point

Method of molecular dynamics is used for calculation of thermodynamic properties of copper: temperature dependence of melting heat and temperature and pressure dependence of specific heat, coefficient of linear expansion and density. The obtained dependences are compared with experiment. These dependences can be used as input data for the continuum model of pulsed laser heating of matter.

Key words: molecular dynamics, copper, EAM potential

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 16-07-00263.

Оглавление

Введение	3
Постановка задачи	3
Моделирование и анализ результатов	7
Расчет равновесной температуры плавления	7
Расчет удельной теплоты плавления	. 10
Расчет удельной теплоемкости, линейного расширения и плотности	.11
Заключение	.16
Литература	. 16

Введение

Технологические операции обработки металлов осуществляются в широком температурном диапазоне (от 300К до (3-4)10³К), в котором определяющую роль играют фазовые переходы І-го рода (плавление–кристаллизация, испарение–конденсация). Заход в высокотемпературную область сопряжён с сильным изменением теплофизических свойств обрабатываемых материалов. Исследования кинетики и динамики фазовых превращений осуществляются в основном методами математического моделирования [1]. При построении соответствующих математических моделей необходимо учитывать температурные и барические зависимости материалов. Однако при температурах выше температуры плавления *T_m* экспериментальные данные, как правило, отсутствуют.

Математическое моделирование на основе атомистических моделей стало незаменимым инструментом для получения фундаментальных знаний о процессах [2-4] и свойствах материалов [5,6]. Полученные знания зачастую используются для разработки мезоскопических [7] и макроскопических [8,9] сред, характеристики моделей сплошных В которых материалов, определяемые атомистического моделирования, служат входными ИЗ параметрами [10].

Целью настоящей работы является получение методом молекулярной динамики с использованием ЕАМ потенциала [2] свойств меди вблизи точки плавления. В число исследуемых характеристик для твердой и жидкой фаз Си включены температурные зависимости удельной теплоемкости $C_p(T)$, коэффициента теплового расширения $\alpha(T)$, плотности $\rho(T)$, а также барические зависимости температуры и теплоты плавления $T_m(p)$, $L_m(p)$.

Зависимость температуры плавления от давления для меди ранее получалась экспериментально [12-14] и с помощью моделирования методом молекулярной динамики [15-18]. Для расчета температуры плавления методом молекулярной динамики используются несколько методов: однофазный [14,15], двухфазный [17,19], метод расчета свободной энергии [20, 21], метод гистерезиса [22], z-метод [16, 22]. В настоящей работе все расчеты проводились с использованием пакета LAMMPS [20].

Постановка задачи

Система уравнений молекулярной динамики

Молекулярно-динамическое моделирование основано на представлении объекта в виде множества частиц, каждая из которых рассматривается как материальная точка. Выделяется некоторый объем, в котором находятся частицы, для каждой из них задаются масса, радиус-вектор и скорость, т.е. соответственно m_i , \vec{r}_i , \vec{v}_i , где i = 1, ..N, N - общее количество частиц.

Движения, которые могут быть описаны уравнениями Ньютона, происходят за счет взаимодействия частиц между собой и с внешними полями. Главным образом используется второй закон $\vec{F} = m\vec{a}$. Выбирается некоторая функция $U(\vec{r_1},...,\vec{r_N})$ – потенциальная энергия всей системы. Тогда каждая частица взаимодействует с остальными с силами $\vec{F_i} = -\frac{\partial U(\vec{r_1}...\vec{r_N})}{\partial \vec{r_i}}$, с внешними полями

 $-\vec{F}_i^{ext}$.

Получаем систему из 2N дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} m_i \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{F}_i + F_i^{ext} \\ \frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \end{cases}, \ i = 1...N \end{cases}$$

Для ее решения необходимо задать начальные условия.

Начальные условия

Особенностью задания начальных условий в молекулярной динамике является необходимость формирования на начальной стадии расчетов состояния термодинамического равновесия для всего ансамбля частиц образца.

Координаты частиц задаются в узлах решетки в соответствии с типом кристаллической решетки. Для их определения используется постоянная решетки *a*, температурная зависимость которой *a*_T определяется из теоремы о вириале:

$$\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} r_{0j} \frac{\partial u(r_{01} \dots r_{0j} \dots r_{0N})}{\partial r_{0j}} = 3k_B T , \ r_{0j} = a_T \tilde{r}_{0j} , \qquad (2)$$

где $\tilde{r}_{0j} = \sqrt{\tilde{x}_{0j}^2 + \tilde{y}_{0j}^2 + \tilde{z}_{0j}^2}$ – расстояние от начала координат до *j*-й частицы, находящейся в узле решетки, k_B – постоянная Больцмана. Получаемое таким образом значение *а*_T оказывается заниженным, т.к. в нем учитываются отклонения координат частиц от положений равновесия. Уточнение осуществляется построением невозмущенной кристаллической решетки с периодом *а*_{*T*}, с увеличением при этом кинетической энергии ансамбля частиц. С этой целью скорости частиц задаются как случайные величины с распределением Максвелла, соответствующим удвоенной температуре 27. Полученная модель соответствует тому, что в системе все атомы находятся в узлах решетки и имеют скорости, соответствующие термодинамическому равновесию. При этом вся энергия системы состоит только из кинетической, перед началом вычислительных экспериментов поэтому необходимо которой провести релаксацию моделируемого объекта, при часть кинетической энергии перейдет в потенциальную и затем практически не будет изменяться, а температура объекта станет равной Т.

Применение соответствующей процедуры релаксации к моделируемому ансамблю частиц позволяет в течение достаточно короткого времени осуществить выравнивание тепловой и потенциальной энергии.

Граничные условия

Так как система дифференциальных уравнений получается достаточно большой, то для упрощения вычислений задаются периодические граничные условия. В зависимости от ситуации используются периодические граничные условия по двум или трем направлениям. Рассматривая в качестве моделируемого объекта параллелепипед с размерами *a,b,c* соответственно по осям Ox, Oy, Oz, отметим особенности формулировки граничных условий для системы ОДУ. При периодических граничных условиях по Ox считают, что частица, вышедшая через правую границу, заменяется на частицу, имеющую такую же скорость, но вошедшую через левую границу. Таким образом, координата частицы изменяется следующим образом: $x' = (x-a) \in [0,a)$, при $x' \in [a,2a)$, где x' новая координата, x старая. При этом остальные координаты и скорость не изменяются. Аналогично для частицы, выходящей через левую границу области.

В дальнейшем система ОДУ решается с помощью схемы Верле [25]. В этом методе координаты частиц вычисляются на целых временных слоях, а скорости – на полуцелых.

Для учета межатомного взаимодействия использовался полуэмпирический потенциал "погруженного атома", приведенный в [11]. Управление температурой и давлением осуществлялось термостатом [26] и баростатом Берендсена [27].

Потенциал межатомного взаимодействия

Моделирование осуществлялось с использованием EAM потенциала из работы Мишина [11], который присутствует в пакете LAMMPS в виде таблиц. Таблицы получены табулированием следующих аналитических зависимостей из работы [11] (в статье приводятся 2 потенциала, использовался тот, который обозначался как EAM1).

Полная энергия системы задается как

$$E_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(r_{i,j}) + \sum_{i} F(\overline{\rho}_i).$$

Здесь $V(r_{i,j})$ – это парный потенциал как функция расстояния $r_{i,j}$ между атомами *i* и *j*, и *F* – это энергия погружения как функция электронной плотности $\overline{\rho}_i$, вызванной в точке *i* всеми другими атомами системы,

$$\overline{\rho}_i = \sum_{i \neq j} \rho(r_{i,j}),$$

где $\rho(r_{i,j})$ – это функция электронной плотности.

Парная функция задается как

$$V(r) = \left[E_1 M(r, r_0^{(1)}, \alpha_1) + E_2 M(r, r_0^{(2)}, \alpha_2) + \delta \right] \psi \left(\frac{r - r_c}{h} \right) - \sum_{n=1}^3 H(r_s^{(n)} - r)(r_s^{(n)} - r)^4 ,$$

где $M(r, r_0, \alpha) = \exp(-2\alpha(r - r_0)) - 2\exp(-\alpha(r - r_0))$ – это функция Морзе и H(x) – это ступенька. Функция отсечки $\psi(x)$ определяется как $\psi(x) = 0$ при $x \ge 0$ и $\psi(x) = x^4/(1 + x^4)$ при x < 0.

Электронная плотность задается как

$$\rho(r) = \left[a \exp(-\beta_1 (r - r_0^{(3)})^2) + \exp(-\beta_2 (r - r_0^{(4)})) \right] \psi\left(\frac{r - r_c}{h}\right).$$

Функция $\rho(r)$ нормализована до $\overline{\rho} = 1$ в равновесном кристалле, $\overline{\rho} = \sum N_m \rho_m = 1.$

параметр	значение	параметр	значение
r _c	5.50679 A	<i>S</i> ₃	1.15000×10 ³
h	0.50037 A	а	3.80362
E_1	$2.01458 \times 10^2 \text{B}$	$r_0^{(3)}$	-2.19885 A
E_2	6.59288×10 ⁻³ эВ	$r_0^{(4)}$	-2.61984×10 ² A
$r_0^{(1)}$	0.83591 A	β_1	0.17394 A ⁻²
$r_0^{(2)}$	4.46867 A	β_2	5.35661×10 ² A ⁻¹
α_1	2.97758 A ⁻¹	$F^{(0)}$	-2.28235 эВ
α_2	1.54927 A ⁻¹	$F^{(2)}$	1.35535 эВ
δ	0.86225×10 ⁻² A	q_1	-1.27775 эВ
$r_{s}^{(1)}$	2.24000 A	q_2	-0.86074 эВ
$r_{s}^{(2)}$	1.80000 A	<i>q</i> ₃	1.78804 эВ
$r_{s}^{(3)}$	1.20000 A	q_4	2.97571 эВ
S_1	4.00000 3B/A ⁴	Q_1	0.40000
<i>S</i> ₂	40.00000 эВ/А ⁴	Q_2	0.30000

Таблица 1. Параметры ЕАМ потенциала

Для функции V(r) также требуется выполнение условия механического равновесия

 $\sum_{m} N_{m} R_{m} V'_{m} = 0.$ Здесь $V_{m} = V(R_{m})$ и $\rho_{m} = \rho(R_{m})$, где R_{m} и N_{m} – это радиус и число атомов для т-й координационной сферы. Из этих уравнений можно выразить *a* и E_{1} . Функция погружения задается как полином

$$\begin{split} F(\overline{\rho}) &= F^{(0)} + \frac{1}{2} F^{(2)} (\overline{\rho} - 1)^2 + \sum_{n=1}^4 q_n (\overline{\rho} - 1)^{n+2} & \text{для } \overline{\rho} < 1, \\ F(\overline{\rho}) &= \frac{F^{(0)} + \frac{1}{2} F^{(2)} (\overline{\rho} - 1)^2 + q_1 (\overline{\rho} - 1)^3 + Q_1 (\overline{\rho} - 1)^4}{1 + Q_2 (\overline{\rho} - 1)^3} & \text{для } \overline{\rho} > 1. \end{split}$$

Коэффициенты $F^{(0)}$ и $F^{(2)}$ можно выразить через экспериментальные значения энергии когезии E_0 и модуля сжатия B,

$$\begin{split} F^{(0)} &= E_0 - \frac{1}{2} \sum_m N_m V_m , \\ \frac{1}{2} \sum_m N_m V''_m R_m^2 + F^{(2)} \bigg(\sum_m N_m \rho'_m R_m \bigg)^2 = 9 B \Omega_0 , \end{split}$$

где Ω_0 – это равновесный атомный объем. q_1 определяется из граничных условий F(0) = 0. Далее в статье [11] проводится оптимизация потенциала так, чтобы он давал наиболее точное совпадение с экспериментальными данными. Полученные параметры потенциала приводятся в таблице 1.

Моделирование и анализ результатов

В последние десятилетия молекулярно-динамическое моделирование используется для определения основных равновесных [28-31] и неравновесных [32,33] свойств межфазного раздела твердое тело-жидкость.

Плавление/кристаллизация относится к фазовым переходам І-го рода и представляет собой процесс перехода вещества ИЗ твердого кристаллического состояния в жидкое и обратно с поглощением/выделением Основными характеристиками плавления/кристаллизации теплоты. являются температура плавления T_m и теплота плавления L_m. Наличие определённой температуры плавления является признаком кристаллического строения твёрдой фазы. По этому признаку кристаллические вещества легко отличаются от аморфных твёрдых тел, которые не имеют фиксированной температуры плавления. Переход аморфных твёрдых тел в жидкое состояние происходит постепенно в определённом диапазоне температур. Обе характеристики: температура и теплота плавления – зависят от внешнего давления $p: T_m = T_m(p), L_m = L_m(p).$ Для чистых веществ эти зависимости представляют собой кривые сосуществования твёрдой и жидкой фаз. $T_m = T_m(p)$

Расчет равновесной температуры плавления

В постановочной части атомистического моделирования с целью вычисления равновесной температуры плавления использовался метод сосуществования твердой и жидкой фаз [12], согласно которому вначале выбирается область в виде параллелепипеда с размерами 20*10*10 элементарных ячеек, рис. 1. При этом половина образца представлена в твердом кристаллическом виде, а вторая половина – в виде жидкости. Рассматриваемый металл медь имеет гранецентрированную кубическую решетку, поэтому в такой области содержится 8000 частиц. По всем трем осям задаются периодические граничные условия.



Рис. 1. Образец для расчета равновесной температуры плавления



Рис. 2. Определение температуры плавления

В начальных условиях установление термодинамического равновесия осуществляется с помощью процедуры релаксации. Релаксация частиц осуществляется при определенной температуре. Для достижения релаксации при $T_0 = 300$ К задаются начальные скорости частиц, соответствующие максвелловскому распределению при температуре $2T_0 = 600$ К. Молекулярнодинамический расчет производится при нулевом давлении, которое обеспечивается баростатом Берендсена. Через несколько пикосекунд в результате перераспределения исходной кинетической энергии частично в кинетическую и частично в потенциальную достигается равновесная температура образца, равная 300К. Отметим, что методы релаксации, используемые для установления равновесия, зачастую требуют временного периода, длительность которого может превышать длительность основного моделирования.

Для определения температуры плавления *т*_m вначале проводится несколько расчетов нагрева и плавления образца с целью примерного определения диапазона, в котором лежит искомая температура. Затем весь образец нагревается до температуры чуть ниже температуры плавления, 1325 К. После этого одна половина образца удерживается термостатом при этой температуре, а другая нагревается до 2200 К. При этой температуре можно наблюдать, что с одной стороны будет видна кристаллическая решетка меди, с другой – хаотическое расположение молекул, что означает, что вещество находится в жидком виде. Также за фазовым состоянием можно следить с помощью параметра порядка.

Затем нагретая часть охлаждается термостатом до температуры 1325 К. Все это время баростатом поддерживается нулевое давление. Затем запускается релаксационный расчет с выключенным термостатом при данной температуре, и затем отключается еще и баростат и продолжается расчет до установления фазового равновесия. Вначале образец немного начнет кристаллизоваться и поэтому нагреется. Как только наступит фазовое равновесие, температура будет флуктуировать около равновесной температуры плавления, рис. 2. В данном случае температура получилась равной 1330 К.

Справочное значение равновесной температуры плавления 1356 К [21], т.е. значение, полученное с помощью моделирования, отличается на 1.9 % от экспериментального.

Затем аналогичным образом была вычислена температура плавления в зависимости от давления, рис. 3. В каждом расчете баростатом задается требуемое давление. Исследования проводились в диапазоне значений от 0 до 100 кбар.

На рис.3 приведены барические зависимости $T_m(p)$, расчетным (кривая 2, p = 0-100 кбар) и экспериментальным (кривая 1, p = 0-50 кбар) путём. Сравнение показало, что отличие между зависимостями 1, 2 не превышает нескольких процентов. Теоретическая зависимость 2 с достаточной точностью аппроксимируется линейной функцией

 $T_m(p) = (3,775*p+1330)[K].$

Полученные результаты свидетельствуют также, что выбранный потенциал [2] хорошо описывает барическую зависимость равновесной температуры плавления меди.



Рис. 3. Барическая зависимость температуры плавления меди. 1 – эксперимент, 2 – моделирование

Расчет удельной теплоты плавления

Удельная теплота плавления рассчитывалась как разность энтальпий твердой и жидкой частей при одних и тех же температуре и давлении. Для расчета берутся две области, каждая из них имеет форму куба, размеры 15*15*15 элементарных ячеек. Таким образом, в каждой области 13500 частиц, в расчетах используются периодические граничные условия.

Сначала образец подготавливается при 300 К и нулевом давлении. Далее он нагревается с помощью термостата (с включенным баростатом) до температуры плавления при нулевом давлении 1330 К, и производится релаксационный расчет с включенным баростатом и вычислением энтальпии системы. Энтальпия осциллирует около среднего значения. Отсюда определяется среднее значение энтальпии твердого тела.

Затем образец с начальной температурой 300 К нагревается до 2200 К, до достижения полного расплава образца. Получившаяся жидкость быстро охлаждается до температуры плавления 1330 К. При этом весь образец из-за быстрого охлаждения все равно остается жидкостью. Далее запускается релаксационный расчет, энтальпия системы вычисляется в каждый момент времени, находится ее среднее значение.

Удельная теплота плавления будет равна разности энтальпий для твердого тела и жидкости, рис. 4. Из эксперимента известно значение

теплоты 13010 Дж/моль при нулевом давлении [34]. С помощью моделирования при нулевом давлении получилось значение 11872 Дж/моль. Значения отличаются на 8,7%, что свидетельствует об адекватности используемого потенциала для определения теплоты плавления.



Рис. 4. Зависимость удельной теплоты плавления от давления и сравнение с экспериментальными данными. 1 – эксперимент, 2 – моделирование

Затем расчеты повторяются для других значений давления, заданного баростатом. Таким образом получается зависимость удельной теплоты плавления от давления.

Барическая зависимость удельной теплоты плавления, рис. 4, рассчитывалась по той же схеме для других значений давления, задаваемых баростатом. С помощью МД моделирования была построена линейная зависимость

 $L_m(P) = (25,83*p+11872)[Дж/моль].$

Расчет удельной теплоемкости, линейного расширения и плотности

Вычисление удельной теплоемкости, линейного расширения и плотности производится в рамках одного и того же вычислительного эксперимента. Исследуемый образец задаётся в форме куба, содержащего 30*30*30 элементарных ячеек, что соответствует 108 000 частиц (при меньших размерах возникают слишком большие флуктуации). Релаксация частиц образца осуществляется при температуре 300 К и нулевом давлении. Затем осуществляется медленный нагрев образца с постоянной скоростью, равной примерно 0.5 К/пс. Нагрев продолжается до температуры 2000 К, необходимой для полного расплава образца. При нагревании вычисляется энтальпия *н* (в дальнейшем с ее помощью вычисляется теплоемкость *c_p*),



Рис. 5. График зависимости энтальпии от температуры

На графике зависимости энтальпии от температуры, H(T), рис. 5, виден скачок, показывающий начало плавления твердого вещества, а температура соответствует равновесной температуре плавления. В дальнейшем весь образец становится жидкостью.

Кривые, относящиеся к твердой фазе и жидкости, отдельно аппроксимируются полиномами, а затем каждая из них дифференцируется по температуре. Таким образом получим график зависимости теплоемкости от температуры $C_p(T)$, рис. 6.



Рис. 6. Зависимость удельной теплоемкости при постоянном нулевом давлении от температуры. 1 – эксперимент, 2 – моделирование

Аппроксимировав полученные кривые полиномами, можно написать следующие аналитические зависимости для удельной теплоемкости в твердой и жидкой фазах: $C_{pk}(T) = R*(B_0 + B_1*T + B_2*T^2 + B_3*T^3)_{k=s,\ell}$, где индекс $k = s, \ell$ означает принадлежность к твёрдой и жидкой фазам соответственно, $R = 8,3145 \ Джc/(monthetarrow K)$. В табл. 2 приводятся параметры аппроксимации.

	твердое тело	жидкость
$T_{\min}, [K]$	300	1330
$T_{\max}, [K]$	1330	2000
	19,51313	229,46019
	0,03626	0,034592
	-4,25805E-5	2,06516E-4
	1,8412E-8	-4,12756E-8

Таблица 2. Параметры аппроксимации для теплоемкости



Рис. 7. Зависимость линейных размеров области от температуры. 1 –расчет

Аналогично на графике зависимости линейного размера области от температуры, рис. 7, виден скачок, разделяющий твердое вещество и жидкость. Кривая, относящаяся к твердой фазе, аппроксимируется полиномами и дифференцируется по температуре. Получается график линейного расширения, рис. 8, с экспериментальными данными [34].

Аналитическую зависимость можно записать в следующем виде:

 $\alpha(T) = (B_0 + B_1 * T + B_2 * T^2 + B_3 * T^3) * 10^{-6} [K^{-1}].$

В табл. 3 приводятся параметры аппроксимации.

$T_{\min}, [K]$	300
$T_{\max}, [K]$	1330
B_0	4,26131
B_1	0,04772
	-5,41783E-5
B_3	2,35575E-8

Таблица 3. Параметры апроксимации для коэффициента линейного расширения



Рис. 9. Зависимость плотности от температуры и сравнение со справочными данными. 1 – эксперимент, 2 – расчет

На графике плотности, рис. 9, в точке равновесной температуры плавления виден скачок, разделяющий твердую и жидкую фазу. Разница значений составляет около 5%. При этом разница в экспериментальных значениях [19] – 4,45%. Аппроксимировав полученный график плотности полиномами, получим следующую зависимость:

 $\rho(T) = (B_0 + B_1 * T + B_2 * T^2 + B_3 * T^3)[g / sm^3].$

В табл. 4 приводятся параметры аппроксимации.

	твердое тело	жидкость
$T_{\min}, [K]$	300	1330
$T_{\max}, [K]$	1330	2000
	8,94034	8,86038
	-4,26695E-4	-7,37846E-4
	4,23326E-9	-9,11223E-9
B ₃	-4,47909E-11	6,92571E-12

Таблица 4. Параметры аппроксимации для плотности

Заключение

В результате молекулярно-динамического моделирования получены барические зависимости таких теплофизических характеристик меди, как равновесные температура и удельная теплота плавления, a также температурные зависимости, с переходом через точку плавления, удельной коэффициент линейного теплоемкости расширения $C_n(T)$, $\alpha(T)$, и теплопроводности $\lambda(T)$. Для всех величин получены ПЛОТНОСТИ $\rho(T)$ аналитические полиномиальные аппроксимации.

Проведенные эксперименты по определению физических свойств меди показывают, что выбранный потенциал с хорошей точностью описывает термодинамические свойства меди в окрестности точки плавления. Порядок точности для равновесной температуры плавления 3,7%; для удельной теплоемкости – 9,5%; для коэффициента линейного расширения – 16,6%; для плотности – 2%.

Несмотря на то что все обсуждения в данной работе относятся к Cu, можно надеяться, что аналогичный подход к моделированию теплофизических свойств также может быть распространен на большинство других металлов.

Литература

[1] V.I. Mazhukin. Kinetics and Dynamics of Phase Transformations in Metals Under Action of Ultra-Short High-Power Laser Pulses. Chapter 8, pp.219 -276. In "Laser Pulses – Theory, Technology, and Applications", Ed. by I. Peshko. P 544, InTech, Croatia (2012)

- [2] Y. Mishin, M. Asta, Ju Li. Atomistic modeling of interfaces and their impact on microstructure and properties, Acta Materialia, **58**, 1117–1151 (2010)
- [3] V.I. Mazhukin, A.A. Samokhin, A.V. Shapranov, M.M. Demin. Modeling of thin film explosive boiling—surface evaporation and electron thermal conductivity effect. Materials Research Express **2**(1), 016402 (2015)
- [4] M. V. Shugaev, I. Gnilitskyi, N. M. Bulgakova, L. V. Zhigilei. Mechanism of single-pulse ablative generation of laser-induced periodic surface structures. Phys. Rev. B, 96, 205429 (2017)
- [5] S. Yip (Ed.) *Handbook of Materials Modeling*. Part A. Methods, Part B. Models. Springer, Dordrecht, Berlin, Heidelberg, New York, P. 1553 (2005)
- [6] Yu.V. Petrov, N.A. Inogamov, S.I. Anisimov, K.P. Migdal, V. A. Khokhlov, K.V. Khishchenko. Thermal conductivity of condensed gold in states with the strongly excited electron subsystem. *J. Phys.: Conf. Ser.* **653**, 012087 (2015)
- [7] H. Humadi, N. Ofori-Opoku, N. Provatas, J.J. Hoyt. Atomistic Modeling of Solidification Phenomena Using the Phase-Field-Crystal Model. The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society (TMS), 65(9), 1103–1110 (2013)
- [8] V.I. Mazhukin. Nanosecond Laser Ablation: Mathematical Models, Computational Algorithms, Modeling. In. "Laser Ablation-From Fundamentals to Applications", InTech, (2017)
- [9] J. Monk, Y. Yang, M.I. Mendelev, M. Asta, J.J. Hoyt, Y. Sun. Determination of the crystal-melt interface kinetic coefficient from molecular dynamics simulations. Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., **18**, 015004 (2010)
- [10] V.I. Mazhukin, A.V. Shapranov, A.V. Mazhukin, O.N. Koroleva. Mathematical formulation of a kinetic version of Stefan problem for heterogeneous melting/crystallization of metals, Mathematica Montisnigri, 36, 58-77 (2016)
- [11] Y. Mishin, M.J. Mehl, D.A. Papaconstantopoulos, A.F. Voter, J.D. Kress, Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations, Phys. Rev. B, **63**, 224106 (2001)
- [12] P.W. Mirwald, G.C. Kennedy, The melting curve of gold, silver and copper to 60-kbar pressure: a reinvestigation, J. Geophys. Res. **84**, 6750 (1979)
- [13] S. Japel, B. Schwager, R. Boehler, M. Ross, Melting of copper and nickel at high pressure; the role of d-electrons, Phys. Rev. Lett., **95**, 167801 (2005)
- [14] H. Brand, D.P. Dobson, L. Vocadlo, I.G. Wood, Melting curve of copper measured to 16GPa using a multi-anvil press, High Pressure Res., 26, 185 (2006)
- [15] A.B. Belonoshko, R. Ahuja, O. Eriksson, B. Johansson, Quasi ab initio molecular dynamic study of Cu melting, Phys. Rev. B, **61**, 3838 (2000)
- [16] S. Wang, G. Zhang, H. Liu, and H. Song, Modified Z method to calculate melting curve by molecular dynamics, J. Chem. Phys., **138**, 134101 (2013)
- [17] Y.N. Wu, L.P. Wang, Y.S. Huang, D.M. Wang, Melting of copper under high pressures by molecular dynamics simulation, Chem. Phys. Lett., 515, 217– 220 (2011)
- [18] L. Vocadlo, D. Alfe, G.D. Price, M.J. Gillan, Ab initio melting curve of copper by the phase coexistence approach, J. Chem. Phys., **120**, 2872 (2004)

- [19] J.R. Morris, C.Z. Wang, K.M. Ho, C.T. Chan, Melting line of aluminum from simulations of coexisting phases, Phys. Rev. B, **49**, 3109 (1994)
- [20] J.P. Hansen, L. Verlet, Phase transitions of the Lennard-Jones system, Phys. Rev., **184**, 151 (1969)
- [21] J. Mei, J. W. Davenport, Free-energy calculations and the melting point of Al, Phys. Rev. B, **46**, 21 (1992)
- [22] S. Luo, A. Strachan, D. Swift, Nonequilibrium melting and crystallization of a model Lennard-Jones system, J. Chem. Phys., **120**, 11640 (2004)
- [23] A.B. Belonoshko, N.V. Skorodumova, A. Rosengren, B. Johansson, Melting and critical superheating, Phys. Rev. B, **73**, 012201 (2006)
- [24] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, J. Comput. Phys., **117**, 1 (1995)
- [25] L. Verlet Computer "Experiments" on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard-Jones Molecules, Phys. Rev., **159**, 98-103 (1967)
- [26] H.J.C. Berendsen, J.P.M. Postma, W.F. van Gunsteren, A. DiNola, J.R. Haak, Molecular dynamics with coupling to an external bath, J. Chem. Phys., 81, 3684 3690 (1984)
- [27] M.P. Allen and D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford: Clarendon Press (2002)
- [28] В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, В.Е. Пережигин. Математическое моделирование теплофизических свойств, процессов нагрева и плавления металлов методом молекулярной динамики, *Mathematica Montisnigri*, **24**, 47 66 (2012)
- [29] В.И. Мажукин, А.В. Шапранов, А.Е. Руденко. Сравнительный анализ потенциалов межатомного взаимодействия для кристаллического кремния, Mathematica Montisnigri, **30**, 56-75 (2014)
- [30] B. Sadigh, G. Grimvall, Molecular-dynamics study of thermodynamical properties of liquid copper, Phys. Rev. B, **54**, 15742 (1996)
- [31] T.M. Brown, J.B. Adams, EAM calculations of the thermodynamics of amorphous copper, J. of Non-Crystalline Solids, **180**, 275-284 (1995)
- [32] P.A. Zhilyaev, G.E. Norman, and V.V. Stegailov. Ab Initio Calculations of Thermal Conductivity of Metals with Hot Electrons. Doklady Physics, 58(8), 334–338 (2013)
- [33] K.P. Migdal, Yu.V. Petrov, D.K. Il'nitsky, V.V. Zhakhovsky, N.A. Inogamov, K.V. Khishchenko, D.V. Knyazev, P.R. Levashov, Heat conductivity of copper in two-temperature state, Appl. Phys. A, **122**(4), 408 (2016)
- [34] Физические величины. Справочник. Ред. И.С. Григорьев, Е.З. Мелихов, Москва, Енергоатомиздат (1991)
- [35] J.A. Cahill, A.D. Kirshenbaum, The density of liquid copper from its melting point (1356K) to 2500K and an estimate of its critical constants, J. Phys. Chem., 66, 1080–1082 (1962)