Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

# ТРУДЫ
# 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ

29 ноября – 03 декабря 2021 года

## ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА

Москва–Долгопрудный–Жуковский
МФТИ
2021

УДК 53
ББК 22.3
Т78

Т78 **Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ.** 29 ноября – 03 декабря 2021. **Фундаментальная и прикладная физика** / сост. : К.С. Слободчук, А.В. Гец ;Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет). — Москва–Долгопрудный-Жуковский : МФТИ, 2021. – 544 с.
ISBN 978-5-7417-0785-2

•

Включены результаты оригинальных исследований студентов, аспирантов, преподавателей и научных сотрудников МФТИ и дружественных учебных и научных организаций. Статьи представляют интерес для специалистов в области фундаментальной и прикладной физики.

**УДК 53**
**ББК 22.3**

**ISBN 978-5-7417-0785-2**

© Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», 2021

# Секция фундаментальных основ многомасштабного атомистического моделирования

УДК 538.9

## Энергии образования точечных дефектов кубической фазы магнетита в DFT+U

***М.И. Шутикова[1,2], В.В. Стегайлов[1,2]***

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
[2]Объединённый институт высоких температур РАН

Построение DFT+U-модели кубической фазы магнетита и ее дефектов из первых принципов – задача, актуальная для действующих и разрабатываемых в настоящее время приложений магнетита, а также для рассмотрения таких фундаментальных проблем физики конденсированного состояния, как переход Вервея. Существующие статические ab-initio модели кубической фазы имеют принципиальные отличия (например, наличие или отсутствие запрещенной зоны и отличий двух- и трехвалентных катионов в кубической фазе магнетита в моделях работ [1] и [2]) и дают противоречивые данные о свойствах дефектов кубической фазы [3].

В докладе будет представлена наиболее точная, на наш взгляд, модель кубической фазы магнетита, позволяющая получать количественные характеристики ее точечных дефектов, имеющие хорошее согласие с экспериментальными данными. Будут представлены результаты DFT+U расчетов энергии образования пары Френкеля, состоящей из изолированной вакансии и изолированного междоузельного атома, в кубической фазе магнитного оксида $Fe_3O_4$. Будет обсуждаться проблема локальных минимумов в рамках задачи расчета свойств дефектов в DFT+U и данные, полученные в моделях с и без дополнительной симметризации спиновой плотности. Будет проведено сравнение полученных с и без эффективной поправки Хаббарда данных с экспериментальными данными. Будет показан размерный эффект для конфигураций с дефектами и представлены результаты, полученные после проведения ab-initio молекулярной динамики для дефектных и бездефектных конфигураций.

Работа выполняется при поддержке РФФИ (гранты 20-21-00159, 20-32-90081).

**Литература**

1. Piekarz P. *et al.* Trimeron-phonon coupling in magnetite // Phys. ReV. B. 2021. V. 103, № 10. P. 104303.2. Liu H., Di Valentin C. Band Gap in Magnetite above Verwey Temperature Induced by Symmetry Breaking // J. Phys. Chem. C. 2017. V. 121, № 46. P. 25736–25742.
2. Шутикова М.И., Стегайлов В.В. Энергии образования вакансий кубической фазы магнетита в рамках DFT+U // ЖЭТФ. 2021. V. 160, № 2, P. 249–274.

УДК 538.911

## Исследование процесса формирования кластеров при лазерной абляции методом молекулярной динамики

***А.Н. Гостевская[1], А.В. Маркидонов [1,2]***

[1]Сибирский государственный индустриальный университет
[2] Кузбасский гуманитарно-педагогический институт Кемеровского государственного университета

Физика режимов абляции, свойственных лазерному облучению металлов, моделируется с помощью метода молекулярной динамики [1, 2]. Лазерная абляция, или облучение ультракороткими лазерными импульсами, имеет практический интерес, затрагивающий как экспериментальные, так и теоретические исследования [3–5]. На данный момент существуют теоретические методы, которые основываются на построении тепловых моделей [6], разборе баланса энергии испускания лазера [7], что

позволяет оценить воздействие лазерной абляции на поверхностное строение материала. В ходе литературного анализа было установлено, что метод молекулярно-динамического моделирования позволяет совместить теоретические прогнозы в области физики лазерной абляции и сопоставить их с экспериментально полученными данными.

В настоящем исследовании проводилось изучение влияния ультракоротких лазерных импульсов на изменения атомарной структуры металлов при высокотемпературном воздействии при абляции.

В качестве механизма образования кластерных частиц рассматриваются процессы конденсации облака эжектированных частиц, фазовый взрыв.

Для идентификации кластеров система частиц была разделена на раздельные группы на основе критериев расстояния. Данное расстояние равняется удвоенному значению параметра решетки. Под разными кластерами подразумевается группа частиц, каждая из которых удаляется от частиц этой группы на расстоянии, не превышающем область отсечения. После идентификации кластеров частиц они окрашиваются в определенный цвет согласно их размеру. По мере увеличения количества частиц, принадлежащих кластеру, цветовая гамма менялась с пурпурного на красный.

Для данного исследования проводилось моделирование нагрева, где сам процесс определяется возрастанием числа кластеров, представляющих собой отдельные частицы (рис. 1, а). При охлаждении число определяющихся кластеров сокращается, а размер данных кластеров возрастает, точнее, ранее эжектированные частицы соединяются в группы. Было установлено, что при изменении плотности лазерного излучения количество кластеров возрастает. На рис. 1 число определяющихся кластеров уменьшилось с 32 до 24. Так, исходя из рассмотренной модели, реализуется механизм конденсации продуктов абляции. Именно для этого механизма свойственно образование малых кластеров частиц.

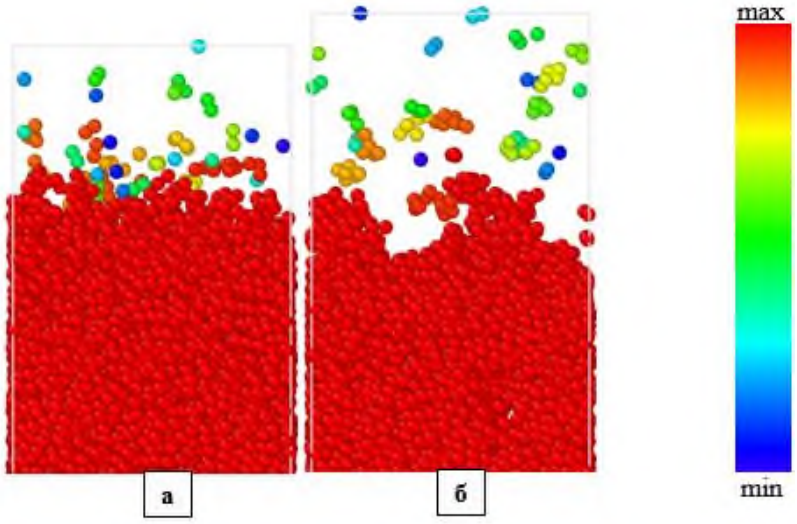


Рис. 1. Представление распознанных кластеров через 10 (а) и 18 (б) пс времени, заданного при моделировании (q = 5 МВт/см$^2$). Цветовая визуализация соответствует размерам кластеров

Из рисунка видно, что число кластеров при увеличении давления уменьшается. Изменение их числа в процессе моделирования представлено на рис. 1.

Из выше сказанного следует, что построенная молекулярно-динамическая модель дает возможность осуществить оценку части эжектированных частиц в результате нагрева расчетной ячейки. Проведено исследование формирования кластеров частиц при абляции.

## Литература


1. *Гостевская А.Н.* Молекулярно-динамическое моделирование лазерной абляции // Издательский центр СибГИУ. 2021. Вып. 25. Ч. I. С. 14–18.
2. *Tabetah M., Matei A., Constantinescu C., Mortensen N., Dinescu M., Schou J., Zhigilei L.V.* The minimum amount of «matrix» needed for matrixassisted pulsed laser deposition of biomolecules // The Journal of Physical Chemistry B. 2014. V. 118. P. 13290–13299.
3. *Song C. Lin T., He P., Zhen J.* Molecular dynamics simulation of linear friction welding between dissimilar Ti-based alloys // Computational Materials Science. 2014. V. 83. P. 35–38.
4. *Anisimov S.I., Luk'yanchuk B.S.* Selected problems of laser ablation theory // Physics-Uspekhi. 2007. V. 45. P. 293. *Bauerle D.* Laser Processing and Chemistry // Luxembourg: springer science business media, 2011. 851 P.
5. *Willis D.A., Grosu V.* The effect of melting-induced volumetric expansion on initiation of laser-induced forward transfer // Applied Surface Science. 2007. V. 253, № 10. P. 4759–4763.

6. *Fardel R., Nagel M., Nuesch F.* Energy Balance in a Laser-Induced Forward Transfer Process Studied by Shadowgraphy // Journal of Physical Chemistry C. 2009. V. 113. P. 11628–11633.

УДК 533.9.01

## Исследование устойчивости цепочечных структур пылевых частиц в плазме с конденсированной дисперсной фазой

***Д.А. Колотинский*** [1,2]***, А.В. Тимофеев*** [1,2]

[1]Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университете)
[2]Объединённый институт высоких температур РАН

Пылевая плазма, или плазма с конденсированной дисперсной фазой, представляет собой слабо ионизированный газ, в котором содержатся частицы конденсированного состояния микронных и субмикронных размеров. Такие частицы, находясь в плазменном окружении, заряжаются отрицательно в силу разности в подвижностях ионной и электронной компонент плазмы. Пылевая плазма наблюдается в космическом пространстве, в хвостах комет и в кольцах планет, также она активно исследуется в лабораториях. Интерес к изучению пылевой плазмы обусловлен как необычностью наблюдаемых в ней явлений – самоорганизация пылевых частиц в сложные упорядоченные структуры, перекачка энергии из плазменной подсистемы в энергию пылевых частиц – так и практическое применение пылевой плазмы. Так, в методе напыления поверхностей в высоком электрическом поле генерируется пылевая плазма, пылевые частицы в которой представляют собой капельки наносимого на поверхность покрытия.

Образование цепочечных пылевых структур экспериментально наблюдалось в большом количестве экспериментов, включая эксперименты на международной космической станции [1, 2]. В условиях микрогравитации формирование пылевых цепочечных структур связывают с эффектом, аналогичным электрореологическому в жидкостях [3]. Для экспериментального исследования цепочечных структур в плазме с КДФ в условиях земной гравитации, пылевые частицы инжектируются в область плазмы газового разряда, ограниченную специальной стеклянной коробкой [4, 5]. В этом случае формирование цепочечных структур объясняется наличием горизонтального конфайнмента из-за присутствия стеклянной коробки и кильватерным следом [6]. В [4, 5] экспериментально исследовался вопрос об устойчивости цепочечных структур пылевых частиц от мощности газового разряда.

В данной работе исследуется условие устойчивости цепочечных структур пылевых частиц в газоразрядной плазме. Исследование проводится с использованием разрабатываемого автором программного пакета «Open Ionwake», предназначенного для согласованного моделирования динамики плазменной и пылевой подсистем плазмы с конденсированной дисперсной фазы. В результате работы теоретически рассчитываются параметры плазменно-пылевой системы, при которых цепочечная структура пылевых частиц становится неустойчивой. Результаты данный работы могут быть в дальнейшем использованы при постановки экспериментов и для уточнения описания свойств плазменно-пылевой системы.

### Литература

1. *Ivlev A.V. et al.* Complex plasmas in external fields: The role of non-Hamiltonian interactions // Physical review letters. 2011. V. 106, N 15. P. 155001.
2. *Arp O., Goree J., Piel A.* Particle chains in a dilute dusty plasma with subsonic ion flow // Physical Review E. 2012. V. 85, N 4. P. 046409.
3. *Ivlev A.V.* et al. First observation of electrorheological plasmas // Physical review letters. 2008. T. 100, N 9. C. 095003.
4. *Kong J. et al.* Interaction force in a vertical dust chain inside a glass box // Physical Review E. 2014. V. 90, N 1. P. 013107.
5. *Kong J. et al.* One-dimensional vertical dust strings in a glass box // Physical Review E. 2011. T. 84, N 1. P. 016411.
6. .6 *Hutchinson I.H.* Nonlinear collisionless plasma wakes of small particles // Physics of Plasmas. 2011. V. 18, N 3. P. 032111.