ОСОБЕННОСТИ РЕШЕТОЧНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ТИТАНА И АЛЮМИНИЯ. МЕТОД МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

ТРУБИЦЫН В. Ю., ДОЛГУШЕВА Е. Б.

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН,
426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

АННОТАЦИЯ. Методом молекулярной динамики исследованы особенности температурной зависимости решеточной теплопроводности периодически наноструктурированных материалов на основе титана и алюминия с ГЦК структурой. В качестве модельных систем были выбраны системы с упорядоченными кластерами алюминия кубической формы в титановой матрице, а также с нанопроволоками титана в алюминиевой матрице, расположенными продольно и поперечно направлению теплового потока. Результаты для модельных систем сравниваются с расчетами коэффициента теплопроводности чистых алюминия и титана. Проведено обсуждение механизмов, влияющих на поведение кривой теплопроводности в различных интервалах температур. Обсуждается влияние структуры материала на коэффициент решеточной теплопроводности. Показано, что полученные данные могут быть использованы для обучения нейронной сети с целью предсказания температурной и структурной зависимости коэффициента теплопроводности наноструктурированных материалов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: метод молекулярной динамики, коэффициент теплопроводности, фононы, нейронные сети, метастабильное состояние.

ВВЕДЕНИЕ

Одной из наиболее важных технологических и эксплуатационных характеристик материала является теплопроводность. Как известно, коэффициент теплопроводности является коэффициентом пропорциональности между потоком тепла проходящим в единицу времени через единицу площади перпендикулярной градиенту температуры и величиной градиента температуры. В общем случае коэффициент теплопроводности $\kappa(T)$ является тензорной величиной. В приближении изотропного твердого тела он становится скаляром. Основными переносчиками тепла в твердых телах являются электроны и фононы. В металлах основной вклад в теплопроводность определяется свободными электронами. Вклад фононной подсистемы в металлах на два порядка меньше вклада электронной подсистемы. В неметаллических твердых телах свободные электроны отсутствуют и основной вклад в $\kappa(T)$ дают фононы. В приближении газа свободных частиц коэффициент теплопроводности можно записать в виде линейной функцией теплоемкости, скорости частиц и длины свободного пробега электронов или фононов. В реальных кристаллических твердых телах со сложным спектром электронов и фононов, сложной геометрией поверхности Ферми расчет кинетических коэффициентов является трудновыполнимой задачей. Экспериментально электронный вклад в теплопроводность можно приближенно оценить, используя закон Видемана-Франца, связывающего электронную теплопроводность и электропроводность. Теория переноса тепла колебаниями решетки в металлах до сих пор находится в стадии, которая не позволяет установить точную количественную зависимость решеточной (фононной) теплопроводности от температуры. Примеси, содержащиеся в сплавах или в металлах со значительным числом дефектов подавляют электронную компоненту за счет уменьшения длины свободного пробега электронов. Длина свободного пробега фононов определяется главным образом фонон-фононным и электрон-фононным взаимодействием, а также рассеянием фононов на дефектах решетки и границах образца как внешних, так и внутренних. В общем случае, в сплавах, решеточную компоненту полной теплопроводности можно определить точнее, чем в чистых металлах, так как ее величина становится соизмеримой с электронной, а последнюю можно оценить из измерений

электропроводности. Для чистых металлов, самый простой способ определить решеточную теплопроводность состоит в экстраполяции результатов измерения для сплавов различного состава к нулевой концентрации примесей.

Одним из эффективных методов расчета решеточной теплопроводности является использование неравновесной молекулярной динамики (NEMD) [1, 2]. В данном методе тепловой поток формируется за счет периодического добавления энергии в одну область кристаллита с одновременным уменьшением энергии на такую же величину в другой области кристаллита. Фактически эти две области выступают в качестве источника и стока теплового потока. В работе [3] предложен HEX алгоритм (heat exchange), в котором нетрансляционная кинетическая энергия регулируется изменением скорости при сохранении центра масс каждого из двух тепловых резервуаров. К сожалению, как показал опыт последующих расчетов, этот алгоритм не обеспечивает сохранение полной энергии в процессе численного моделирования на интервалах времени несколько наносекунд. Модифицированная версия этого метода (eHEX), была предложена в работе Wirnsbergera с соавторами [2]. В предложенном методе удалось в 100 раз уменьшить потерю энергии при моделировании, по сравнению с HEX алгоритмом и проводить расчеты при сохранении стационарного теплового потока на интервале времени до 100 нс.

В данной работе методом неравновесной молекулярной динамики проведены исследования решеточной теплопроводности наноструктурированных систем, содержащих периодически расположенные кластеры двух типов: а) в виде нанопроволок ГЦК-Ti квадратного сечения в алюминиевой матрице и б) кубических кластеров ГЦК-Al в титановой матрице. Полученные тепловые характеристики наноструктурированных соединений сравниваются с аналогичными параметрами чистых ГЦК-Ti и Al. Как показано в работах [4 – 6], периодичность нанокластеров в таких системах оказывает существенное влияние на особенности формирования фононного спектра и температурной зависимости теплоемкости. Исследование переноса тепла наноструктурированными материалами, в которых в матрицу со стабильной решеткой встроены кластеры с метастабильной структурой, располагающиеся в строго определенной периодичности представляют как фундаментальный, так и практический интерес.

МЕТОДЫ РАСЧЕТОВ

Физические характеристики Ti и Al и их систем изучались методом молекулярной динамики с использованием пакетов XMD [7] и LAMMPS [8]. Для описания межатомного взаимодействия в титане и алюминии были выбраны многочастичные потенциалы [9], построенные в рамках модели «погруженного атома» [10]. В [9] было показано, что эти потенциалы позволяют получить, с высокой степенью точности, параметры ОЦК и ГПУ решеток титана и ГЦК алюминия, когезионные энергии, упругие постоянные, температуры плавления и другие физические характеристики как для чистых титана и алюминия, так и для их различных соединений.

Ранее с этими потенциалами в работе [6] нами были получены фононные спектры, упругие модули и теплоемкости для ГЦК-Ti, Al и различных наноструктурированных систем Ti-Al при различных температурах. Рассчитанные упругие модули метастабильной фазы ГЦК-Ti имеют положительные значения, что говорит о "виртуальной" стабильности этой структуры и возможности моделирования её свойств. Также получено хорошее согласие рассчитанного значения параметра решетки ГЦК-Ti с экспериментом [11], где титан со структурой ГЦК осаждался на пленке Al(001).

Расчет коэффициента теплопроводности проводился с использованием неравновесной молекулярной динамики по формуле [2]:

$$\kappa(T) = -\Delta Q \cdot (\Delta T / \Delta L),$$

где ΔQ – количество энергии, проходящей в единицу времени через единицу площади поперечного сечения кристаллита: $\Delta T / \Delta L$ – градиент температуры. Во всех вариантах расчет начинался с инициализации кристаллита с идеальной ГЦК структурой и релаксации в

течение 1 нс в условиях NPT ансамбля, при заданной температуре минимизировалась энергия и определялись параметры ячейки.

Моделирование проводилось на кристаллитах с размерами $L_x = L_y = L_z/2 = 10, 12, 15$ элементарных ячеек, с временным шагом $\Delta t = 1$ фс и периодическими граничными условиями вдоль всех осей. Для создания градиента температур вдоль оси z , создавались два резервуара (с «горячей» и «холодной» областью) шириной примерно равной $\Delta L_z \sim L_z/20$, центрированные в точках $z = \pm L_z/4$, при условии, что $z = 0$ находится в центре кристаллита ($L_z/2$). Добавление энергии ΔQ к «горячей» области и отвод такого же количества энергии из «холодной» области проводилось на каждом временном шаге моделирования NVE ансамбля.

Система приходила в стационарный режим в течение 2 нс. Для вычисления градиента температуры и визуализации изменения температуры вдоль направления $[001]$ кристаллит разбивался на слои, толщиной в одну ячейку, в каждом из которых вычислялась средняя температура по слою. Окончательно, градиент температуры вычислялся путем усреднения значения ΔT на интервале времени не менее 3 нс. Для реализации данного алгоритма расчета коэффициента теплопроводности использовался пакет молекулярной динамики LAMMPS, апробированном в работе [12]. Вычисленные значения коэффициента теплопроводности при каждой заданной температуре усреднялись по трем реализациям.

КОЭФФИЦИЕНТЫ РЕШЕТОЧНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НАНОСТРУКТУР

Для исследования особенностей распространения тепла в наноматериалах, были выбраны модельные системы на основе титана и алюминия. На рис. 1 показаны примеры базовых кристаллитов, для которых в дальнейшем проводились расчеты теплопроводности. Далее в тексте они обозначены римскими цифрами (I, II, III, IV).

Рис. 1. Конфигурации модельных структур для расчета теплопроводности:

I – $\text{Ti}_{44}\text{Al}_{56}$; II – $\text{Ti}_{44}\text{Al}_{56}$; III – $\text{Ti}_{70}\text{Al}_{30}$; IV – $\text{Ti}_{88}\text{Al}_{12}$.

Темные (синие) – атомы титана, светлые (зеленые) – алюминия

Модельная система I представляет собой кластеры титана в виде бесконечных вдоль оси z нанопроволок квадратного сечения. В x и y направлениях размер нанопроволок был равен двум параметрам решетки элементарных ГЦК ячеек. Каждая проволока отделяется от соседней двумя слоями алюминия. Процентное содержание титана и алюминия в этой системе 44 и 56, соответственно. Нанопроволоки расположены вдоль направления процесса теплопереноса. Система II также содержит кластеры титана в виде бесконечных

нанопроволок разделенных двумя слоями алюминия, но направленных вдоль оси x , т.е. перпендикулярно распространению теплового потока. III конфигурация атомов состоит из кубических кластеров алюминия, разделенных друг от друга со всех сторон двумя слоями титана. Эта система содержит 30 % атомов Al и 70 % – Ti. Структура IV содержит кубики алюминия такого же размера, что и в системе III, но отделенные со всех сторон четырьмя слоями титана, процентное содержание, соответственно, Ti – 88 %, Al – 12 %.

Таким образом, первые два варианта представляют собой упорядоченную систему нанопроволок титана в алюминиевой матрице, третий и четвертый варианты соответствуют упорядочено-расположенным кубическим кластерам алюминия в титановой матрице. Атомы титана на рисунках изображены темными кружками, атомы алюминия – светлыми.

Кроме наноструктурированных систем рассматривались образцы чистого алюминия и титана с ГЦК структурой.

На следующих рисунках (2 – 4) представлены результаты расчетов решеточной части коэффициента теплопроводности для всех перечисленных систем в зависимости от температуры. На рис. 2 показана температурная зависимость решеточной теплопроводности для чистых ГЦК алюминия и титана. Как видно из графиков, кривая $\kappa(T)$ для алюминия имеет довольно резкий скачок в области $T = 125 - 150$ K, а при температуре выше $T = 300$ K медленно уменьшается. Сильный рост теплопроводности на этом интервале температур связан с увеличением числа возбужденных фононов, которые и являются переносчиками тепла. При температурах порядка температуры Дебая, все фононные состояния активированы и рост теплопроводности с повышением температуры останавливается. Дальнейшее увеличение температуры приводит к тому, что усиливаются процессы фонон-фононного рассеяния, которые приводят к уменьшению длины свободного пробега фононов и, как следствие, к незначительному уменьшению коэффициента теплопроводности.

Рис. 2. Решеточная теплопроводность ГЦК-Al и ГЦК-Ti

Такое классическое представление о температурной зависимости решеточной теплопроводности полностью соответствует результатам расчета, приведенным на рис. 2 для чистого ГЦК-Ti, для которого мы провели расчет до 1000 K. Температурная зависимость решеточного вклада в коэффициент теплопроводности ГЦК-Ti до 150 K почти совпадает с Al, увеличение $\kappa(T)$ более монотонное до $T = 300 - 400$ K, после чего наблюдается медленное уменьшение. Отметим, что для чистых Ti и Al при низких температурах ($T = 10$ K) теплопроводность стремится к нулевым значениям. Используя представление о фононной подсистеме, как о газе частиц, коэффициент теплопроводности можно записать в следующей форме: $\kappa(T) \sim C_v \lambda NV$, где C_v – теплоемкость фононного газа, λ – длина свободного пробега фононов, N – число частиц переносчиков энергии (фононов), V – скорость звука. При низких температурах процессы фонон-фононного рассеяния малы. Следствием этого является слабая зависимость длины свободного пробега от температуры.

Основной вклад в температурную зависимость $\kappa(T)$ в этой области дает теплоемкость, которая в объемных материалах при низких температурах имеет асимптотику $C \sim T^3$. Определить асимптотику коэффициента теплопроводности в нашем расчете затруднительно, так при низких температурах ($T < 10$ K) неравновесные молекулярно-динамические расчеты требуют значительных затрат машинного времени. Тем не менее, в чистых металлах Ti и Al коэффициент теплопроводности стремится к нулю.

Как видно из рис. 3, для наноструктурированных систем I и II (продольные и поперечные тепловому потоку нанопроволоки) коэффициент решеточной теплопроводности ведет себя аномально, а именно увеличивается при уменьшении температуры ниже 40 K, а при температуре $T = 100$ K коэффициенты $\kappa(T)$ для обеих систем равны. При температуре ниже 100 K коэффициент теплопроводности больше для поперечных потоку проволок (II), по сравнению с проволоками, расположенными вдоль теплового потока (I).

Рис. 3. Температурная зависимость решеточной теплопроводности для структур I и II, содержащих титановые «проволоки» вытянутые вдоль (I) и поперек (II) теплового потока

Этот эффект можно объяснить с точки зрения рассеяния фононов на неоднородностях разного масштаба. При низких температурах в системе в основном существуют фононы, соответствующие длинноволновым колебаниям с маленькими волновыми векторами и низкой энергией. Такие длинноволновые колебания практически не рассеиваются на неоднородностях, которые представляют собой периодический набор проволок титана в алюминиевой матрице размером в 2 ГЦК ячейки каждая, расположенные перпендикулярно направлению распространения теплового потока (система II). В системе I, при низких температурах длинноволновые колебания эффективно рассеиваются на границах раздела проволока-матрица, которые бесконечны в направлении потока тепла и поэтому рассеяние происходит при любых длинах волн, что приводит к уменьшению длины свободного пробега фононов. Таким образом, слабое рассеяние фононов при низкой температуре в системе II приводит к большей длине свободного пробега по отношению к λ в системе I и, соответственно, более высокому значению $\kappa(T)$.

При повышении температуры число высокоэнергетических фононов с небольшой длиной волны возрастает, что приводит к увеличению рассеяния на перпендикулярных к направлению распространения теплового потока внутренних границах Ti-Al, тогда как для продольно расположенных проволок рассеяние слабо зависит от температуры. В результате коэффициент теплопроводности при высоких температурах в системе I становится больше, чем в системе II.

Рассмотрим процессы в области температур до 50 K. Как видно из рис. 3, при уменьшении температуры наблюдается существенный рост $\kappa(T)$. Так как ни теплоемкость, ни скорости фононов, ни число частиц в этой области температур существенно не меняются, такое изменение коэффициента теплопроводности может быть связано только с резким

увеличением длины свободного пробега при уменьшении температуры. В этой области температур существенны два основных механизма, влияющие на процессы рассеяния фононов. Первый из них связан с рассеянием на примесях. Длина свободного пробега фононов при учете эффектов рассеяния на одиночной примеси пропорциональна $1/T^4$ [13], следовательно, при уменьшении температуры процессы рассеяния на примесях должны приводить к увеличению коэффициента теплопроводности. Однако, учитывая, что при низких температурах длина свободного пробега может составлять сотни параметров решетки, эффективность такого рассеяния на точечных дефектах размера параметра решетки мала при небольшом количестве примеси. Другим механизмом вызывающим повышение теплопроводности при низких температурах, в нашем случае, может быть эффект волновода. Для длинноволновых фононов внутренние границы, образованные включением проволок титана в алюминиевую матрицу являются своеобразными волноводами, вдоль которых распространяются фононы – переносчики тепловой энергии. Если для структуры I геометрия системы волноводов более менее очевидна, то для структуры II, перпендикулярно расположенных нанопроволок, требуется дополнительное пояснение. Из рис. 1 видно, что в структуре I имеется два вида бесконечных по оси z областей. Это, во-первых, проволоки титана и, во-вторых, области между проволоками, образованные матрицей алюминия. Обе эти области могут служить каналами образования волноводов для длинноволновых колебаний. В системе II, тоже имеется область, связанная с матрицей алюминия, которая представляет собой набор бесконечных по оси z плоскостей толщиной в два атома алюминия. Реальные причины повышения теплопроводности при температурах меньше 50 K требуют дополнительных исследований.

Рис. 4. Температурная зависимость решеточной теплопроводности для наноструктурированных систем III и IV (кубики алюминия в титановой матрице, см. рис. 1)

На рис. 4 представлены температурные зависимости коэффициента решеточной теплопроводности для структур III и IV. Напомним, что они представляют собой упорядоченную систему кластеров алюминия кубической формы в титановой матрице. Различие между ними заключается только в расстоянии между кластерами: в системе III кластеры разделены двумя плоскостями атомов титана, а в системе IV – таких плоскостей четыре. Как видно из рис. 4 коэффициент теплопроводности для этих систем меньше, чем для чистых титана и алюминия. Интересно, что в системе III содержание титана меньше, чем в IV, но теплопроводность её меньше, хотя для чистых титана и алюминия наблюдается противоположная зависимость. Кроме того, необходимо отметить, что системы упорядоченных кубиков обладают более стабильным коэффициентом теплопроводности при изменении температуры. Так в области температур от 50 K до 300 K теплопроводность меняется в интервале 1,6 – 2,0 W/(m·K) для системы III и 1,6 – 2,4 W/(m·K) для системы IV,

тогда как для чистых алюминия и титана решеточная теплопроводность в этом интервале температур меняется в 6 – 7 раз (см. рис. 2). Наблюдается также различие в поведении $\kappa(T)$ при температурах $T < 50$ К по сравнению со структурами I и II. В этой области коэффициент теплопроводности при низких температурах в системах III и IV стремится к нулю, тогда как в структурах I и II (рис. 3) наблюдается рост $\kappa(T)$.

Таким образом, использование метода неравновесной молекулярной динамики, позволяет определять вклад решетки в теплопроводность для сложных многокомпонентных наноструктурированных систем с различными типами упорядочения.

Существенной проблемой применения методов NEMD является их значительная ресурсоёмкость, как по затратам машинного времени, так и по количеству необходимых вычислительных процедур. Учитывая, что имеется сильная зависимость теплопроводности от внутренней структуры наноматериалов и типа их упорядочения необходимо разрабатывать альтернативные способы определения теплопроводности, позволяющие предсказывать значения $\kappa(T)$ для произвольных упорядоченных наноструктурированных систем.

Одним из подходов для решения этой задачи может быть использование методов машинного обучения и, в частности, использование искусственных нейронных сетей. Обученные на базе больших данных такие сети позволяют получать с огромной скоростью значения не только для входных параметров и данных, на которых они обучались, но и предсказывать с определенной точностью значения для входных параметров, по которым они не обучались.

На рис. 5 приведены результаты работы нейросети, разработанной нами и обученной на полученных в методе неравновесной молекулярной динамики коэффициентах теплопроводности для рассмотренных в настоящей статье структур.

Рис. 5. Температурная зависимость решеточной теплопроводности для наноструктурированных модельных систем Ti-Al. Символы соответствуют результатам NEMD расчета, использованным для обучения нейронной сети. Линии – результаты расчета нейронной сети

Значения теплопроводности, по которым проводилось обучение, обозначены символами. Линии получены с помощью нейросети в результате расчета $\kappa(T)$ на мелкой сетке по температуре. Разработанная нами нейронная сеть имела двухуровневую архитектуру. На первом уровне, для каждого из рассмотренных в настоящей статье наноструктурированного материала строилась своя нейронная сеть с одним входным слоем, одним выходным и одним скрытым слоем. Во входном и выходном слое было по одному узлу, число узлов в скрытом слое варьировалось от 3 до 12 в зависимости от структуры. Обучение каждой сети проводилось на небольшом наборе данных зависимости теплопроводности от температуры, полученных для этой структуры прямым расчетом NEMD методом. Результаты работы этих сетей использовались для обучения основной трехслойной нейронной сети второго уровня, имеющие девять входных узлов, один скрытый слой и один выходной узел. Восемь параметров входного слоя определяли состав и структуру наноматериала, один – температуру. Для обучения этой сети использовались выходные значения нейросетей первого уровня. Необходимо отметить, что на первом этапе при обучении нейронной сети не использовались данные для структуры IV (см. рис. 1). Это позволило нам использовать структуру IV для оценки предсказательных возможностей построенной и обученной нейронной сети. Следует обратить внимание на то, что получить представленное на рис. 5 для системы IV согласование между рассчитанными методом молекулярной динамики коэффициентами теплопроводности (открытые кружки) и предсказанными нейронной сетью значениями (линии) потребовалось доучивать сеть второго уровня с использованием рассчитанных для системы IV коэффициентов $\kappa(T)$ для трех значений температур (на рисунке обозначены ромбиками). С учетом сделанных замечаний можно утверждать, что построенная нейросеть дает адекватное описание температурной зависимости коэффициента решеточной теплопроводности упорядоченных наноструктурированных материалов на основе титана и алюминия в широком интервале температур.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, методом неравновесной молекулярной динамики с потенциалами межатомного взаимодействия, построенными в модели погруженного атома, проведены исследования температурной зависимости решеточной теплопроводности чистых ГЦК-Ti и Al, а также систем с упорядоченными наноструктурами Ti – Al.

Получены температурные зависимости решеточной теплопроводности Al и Ti с идеальной ГЦК структурой в интервале температур 10 – 1000 К. При температуре решетки выше характеристической температуры Дебая, значения решеточного коэффициента теплопроводности медленно снижаются, как и в экспериментах, где наблюдается суммарный эффект от электронного и фононного вклада в коэффициент теплопроводности.

Получены температурные зависимости решеточной теплопроводности для четырех различных конфигураций наноструктур титана и алюминия с периодическими включениями кластеров одного элемента в матрице другого в температурном интервале 10 – 400 К. Показано, что существенную роль в поведении фононной теплопроводности наноструктурированных систем играет их структура.

Показано, что полученные данные могут быть использованы для обучения нейронной сети с целью предсказания температурной и структурной зависимости коэффициента теплопроводности наноструктурированных материалов.

Работа выполнена в рамках тем НИР УдмФИЦ УрО РАН «Теоретические исследования электронных, магнитных, решеточных и транспортных свойств слоистых и наноструктурированных систем» АААА-А17-117022250041-7, «Искусственный интеллект в разработке, обучении и сопровождении экспертных систем представления и использования знаний в естественно-научных, технических и социогуманитарных направлениях» АААА-А19-119092690104-4 и при финансовой поддержке гранта УрО РАН № 18-2-2-12.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Müller-Plathe F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity // Journal of Chemical Physics, 1997, vol. 106, iss. 14, pp. 6082-6085.
2. Wirtzberger P., Frenkel D., Dellago C. An enhanced version of the heat exchange algorithm with excellent energy conservation properties // Journal of Chemical Physics, 2015, vol. 143, iss. 12, pp. 124104(1-8).
3. Ikeshoji T., Hafskjold B. Non-equilibrium molecular dynamics calculation of heat conduction in liquid and through liquid-gas interface // Molecular Physics, 1994, vol. 81, iss. 2, pp. 251-261.
4. Maldovan M. Narrow Low-Frequency Spectrum and Heat Management by Thermocrystals // Physical Review Letters, 2013, vol. 110, iss. 2, pp. 025902(1-5).
5. Wehmeyer G., Yabuki T., Monachon C., Wu J., Dames C. Thermal diodes, regulators, and switches: Physical mechanisms and potential applications // Applied Physics Reviews, 2017, vol. 4, iss. 4, pp. 041304(1-32).
6. Долгушева Е. Б., Трубицын В. Ю. Решеточная теплоемкость наноструктурированных материалов на основе титана/циркония и алюминия // Физика твердого тела. 2018. Т. 60, № 5. С. 835-845. <https://doi.org/10.21883/FTT.2018.05.45774.329>
7. Rifkin J. XMD Molecular Dynamics Program. Version 2.5.32. University of Connecticut, Storrs, 2002. URL: <http://xmd.sourceforge.net/> (дата обращения 11.07.2019).
8. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <https://lammps.sandia.gov/> (дата обращения 11.07.2019).
9. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system // Physical Review B, 2003, vol. 68, iss. 14, pp. 024102(1-14).
10. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals // Physical Review B, 1984, vol. 29, iss. 12, pp. 6443-6453.
11. Kim S. K., Jona F., Marcus P. M. Growth of face-centred-cubic titanium on aluminium // Journal of Physics: Condensed Matter, 1996, vol. 8, iss. 1, pp. 25-32.
12. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // Journal of Computational Physics, 1995, vol. 117, iss. 1, pp. 1-19.
13. Pobell F. Matter and Methods at Low Temperatures. Springer, 2007. 461 p.

PECULIARITY OF LATTICE THERMAL CONDUCTIVITY OF NANOSTRUCTURED MATERIALS BASED ON TITANIUM AND ALUMINUM. MOLECULAR DYNAMICS METHOD

Trubitsin V. Yu., Dolgusheva E. B.

Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the Russian Academy of Science, Izhevsk, Russia

SUMMARY. The method of nonequilibrium molecular dynamics realized in the LAMMPS package is used to study the lattice thermal conductivity of nanostructured systems containing periodically arranged clusters of two types: 1) square-section nanowires of *fcc* Ti in aluminum matrix, and 2) cubic clusters of *fcc* Al in titanium matrix. The obtained thermal characteristics of nanostructured compounds are compared with similar parameters of pure *fcc* Ti and Al. The *z*-axis temperature gradient required for the thermal conductivity calculation is created by adding the energy ΔQ to the "hot" region and withdrawing the same amount of energy from the "cold" region. Calculations of the thermal conductivity coefficient are carried out for 4 nanostructured systems. System I consists of square-section *fcc* Ti nanowires in aluminum matrix, ordered in the *xy* plane and infinite along the *z*-axis. System II is composed of similar Ti nanowires perpendicular to the heat flow propagation direction. Systems III and IV are formed by cubic clusters of aluminum ordered in the *x,y,z* directions, which are separated from each other on every side by two (III) or four (IV) layers of titanium. The simulation results show that the lattice thermal conductivity coefficient $\kappa(T)$ for aluminum has a rather sharp jump in the temperature range $T=125-150$ K. The temperature dependence of $\kappa(T)$ in *fcc* Ti almost coincides with that of Al up to 150 K, and then monotonically increases to $T=300-400$ K. At a maximum, the thermal conductivity of titanium is 1.2 times less than that of aluminum. For pure Ti and Al a slow decrease in thermal conductivity is observed at high temperatures ($T>400$ K). In the low-temperature region, the thermal conductivity tends to zero values, when T tends to 0. Surprisingly, for nanostructured systems I and II, the coefficient of lattice thermal conductivity increases as the temperature decreases below 40 K. At temperatures below 100 K, the thermal conductivity coefficient is greater for the system of nanowires normal to the heat flow (II), while above 100 K the thermal conductivity of system I becomes greater than that of system II. It is shown that the systems of ordered cubes (III and IV) have a more stable coefficient of thermal conductivity when the temperature changes. The mechanisms affecting the thermal conductivity in different temperature ranges are discussed. The data obtained are used to train a three-layer neural network in order to predict the temperature and structural dependence of the thermal conductivity coefficient of periodically nanostructured materials based on Ti and Al.

KEYWORDS: molecular dynamics method, coefficient of thermal conductivity, phonons, neural networks, a metastable state.

REFERENCES

1. Müller-Plathe F. A simple nonequilibrium molecular dynamics method for calculating the thermal conductivity. *Journal of Chemical Physics*, 1997, vol. 106, iss. 14, pp. 6082-6085. <https://doi.org/10.1063/1.473271>
2. Wirtnsberger P., Frenkel D., Dellago C. An enhanced version of the heat exchange algorithm with excellent energy conservation properties. *Journal of Chemical Physics*, 2015, vol. 143, iss. 12, pp. 124104(1-8). <https://doi.org/10.1063/1.4931597>
3. Ikeshoji T., Hafskjold B. Non-equilibrium molecular dynamics calculation of heat conduction in liquid and through liquid-gas interface. *Molecular Physics*, 1994, vol. 81, iss. 2, pp. 251-261. <https://doi.org/10.1080/00268979400100171>
4. Maldovan M. Narrow Low-Frequency Spectrum and Heat Management by Thermocrystals. *Physical Review Letters*, 2013, vol. 110, iss. 2, pp. 025902(1-5). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.025902>
5. Wehmeyer G., Yabuki T., Monachon C., Wu J., Dames C. Thermal diodes, regulators, and switches: Physical mechanisms and potential applications. *Applied Physics Reviews*, 2017, vol. 4, iss. 4, pp. 041304(1-32). <https://doi.org/10.1063/1.5001072>
6. Dolgusheva E. B., Trubitsin V. Yu. Lattice Heat Capacity of Nanostructured Materials Based on Titanium/Zirconium and Aluminum. *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60(5), pp. 837-846. <https://doi.org/10.1134/S1063783418050074>
7. Rifkin J. XMD Molecular Dynamics Program. Version 2.5.32. University of Connecticut, Storrs, 2002. URL: <http://xmd.sourceforge.net/> (accessed July 11, 2019).
8. LAMMPS Molecular Dynamics Simulator. URL: <https://lammps.sandia.gov/> (accessed July 11, 2019).
9. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Physical Review B*, 2003, vol. 68, iss. 14, pp. 024102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.024102>
10. Daw M. S., Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities and other defects in metals. *Physical Review B*, 1984, vol. 29, iss. 12, pp. 6443-6453. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
11. Kim S. K., Jona F., Marcus P. M. Growth of face-centred-cubic titanium on aluminium. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1996, vol. 8, iss. 1, pp. 25-32. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/8/1/005>
12. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, vol. 117, iss. 1, pp. 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
13. Pobell F. Matter and Methods at Low Temperatures. Springer, 2007. 461 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-46360-3>

Трубицын Виктор Юрьевич, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, УдмФИЦ УрО РАН, тел. 8(3412)216911, e-mail: vyu@udman.ru

Долгушева Елена Борисовна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, УдмФИЦ УрО РАН, тел. 8(3412)213966, e-mail: elena@udman.ru