

## Молекулярно–динамическое моделирование теплофизических свойств золота

А. А. Алексашкина\*

*Федеральный исследовательский центр «Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»*

*Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д. 4*

(Поступила в редакцию 15.07.2021; подписана в печать 02.08.2021)

В данной работе методом молекулярно-динамического моделирования получены термодинамические свойства золота: барические зависимости температуры и теплоты плавления в диапазоне от 0 до 100 кбар и температурные зависимости плотности и теплоемкости в диапазоне от 300 до 5000 К, включающем область плавления. Проведенное сравнение результатов моделирования данной работы с результатами экспериментов и работами других авторов, использующих различные подходы, показало хорошее совпадение. Представлена численная и графическая информация о полученных результатах. Моделирование проводилось с помощью пакета LAMMPS, был использован потенциал взаимодействия частиц семейства «погруженного атома» (EAM). Найденные зависимости и величины могут быть в дальнейшем использованы как входные данные континуальной модели импульсного лазерного нагрева вещества.

PACS: 02.70.Ns,

УДК: 004.942

Ключевые слова: молекулярно–динамическое моделирование, потенциал погруженного атома (EAM), теплофизические свойства золота, область плавления-кристаллизации, фазовый переход.

### ВВЕДЕНИЕ

Наночастицы золота могут применяться в различных областях: промышленном производстве [1], научной деятельности [2], и биомедицине или биохимических технологиях [3–7], например, для адресной доставки лекарств, в тераностике или визуализации. Такое широкое применение золото получило благодаря своим уникальным свойствам таким как биоинертность, биосовместимость и маленьким размерам (размер аналогичен размеру многих биологических молекул).

Одним из перспективных направлений получения наночастиц является лазерная абляция исходного материала импульсами ультракороткой ( $10^{-15} - 10^{-12}$  с) длительности [8–10]. Этот метод является простым способом изготовления наночастиц без поверхностно-активных веществ или химических добавок, что делает наночастицы, полученные этим способом, уникальными. Абляция лазерной мишени начинается с поглощения энергии лазерного луча. Когда лазерный луч взаимодействует с мишенью, она начинает нагреваться, плавиться, а затем с поверхности металла начинают высвобождаться частицы. Во время нагрева металла происходит изменение температуры от начальной (300 К) до 4000–5000 К, а также изменение его теплофизических свойств. Важную роль в данном температурном промежутке играют фазовые переходы 1-го рода (плавление, испарение). Проведение экспериментов, связанных с определением характеристик, затруднительно вследствие дороговизны и сложности, особенно в области фазовых переходов, поэтому актуально применение теоретических подходов [11–14]. Метод математического описания [15, 16], а имен-

но, молекулярно-динамическое моделирование применяется как основной инструмент исследования лазерной абляции. Для математического описания быстрых и сильно неравновесных процессов, индуцируемых в металлических мишенях ультракороткими лазерными импульсами, используются атомистические, континуальные и комбинированные модели. Для континуальных моделей входными данными являются термофизические свойства вещества в температурном диапазоне от 300 К до 5000 К.

Цель настоящей работы состоит в получении температурных зависимостей плотности, энтальпии и теплоемкости золота в температурном диапазоне ( $T \sim 300 - 5000$  К), включающем область плавления, а также барических зависимостей равновесной температуры плавления и удельной теплоты плавления золота.

Исследования проводились методом молекулярной динамики. Для проведения моделирования использовался потенциал взаимодействия между частицами EAM [17]. Расчеты проводились с помощью пакета LAMMPS [18]. Для определения теплофизических свойств варьировали параметры моделирования, использовали термостат и баростат Берендсена [19].

В статье представлены результаты атомистического моделирования теплофизических свойств золота в широком температурном диапазоне от 300 К до 5000 К, а также зависимости равновесной температуры и теплоты плавления в диапазоне давлений от 0 до 100 кбар. Полученные зависимости свойств золота аппроксимированы методом наименьших квадратов полиномами невысоких степеней. Результаты сравнения полученных характеристик золота с данными экспериментов и других авторов показывают приемлемое качественное и количественное совпадение. Представлена численная и графическая информация о полученных результатах.

\* ann-tr@yandex.ru

Полученные зависимости теплофизических свойств будут применяться для моделирования лазерной абляции золота с использованием континуальной модели.

## 1. МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ

Определение теплофизических свойств золота проводится с помощью атомистической модели. Для описания и решения таких моделей применяется метод молекулярной динамики, заключающийся в представлении объекта в виде многоатомной системы. Атомы представляются как материальные точки, а их движение и взаимодействие между собой описываются уравнениями классической механики. Так для системы, содержащей  $N$  частиц, для каждой из которых задается масса, скорость, и радиус вектор, с помощью второго закона Ньютона получается система дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} m_i \frac{dv_i}{dt} = F_i + F_i^{ext}, & i = 1 \dots N, \\ \frac{dr_i}{dt} = v_i, \end{cases} \quad (1)$$

где  $F_i = -\frac{\partial U(r_1 \dots r_N)}{\partial r_i}$  — сила взаимодействия между частицами,  $F_i^{ext}$  — сила взаимодействия с внешними полями,  $U(r_1 \dots r_N)$  — потенциальная энергия системы  $N$  частиц. Получившаяся система содержит  $2N$  дифференциальных уравнений.

## 2. НАЧАЛЬНЫЕ И ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

Для решения этой системы задаются начальные условия из предположения, что в начальный момент времени образец находится в термодинамическом равновесии. Золото — кристалл и имеет гранецентрированную кубическую решетку с параметром 4.065. Вначале частицы находятся в узлах этой кристаллической решетки. Скорости частиц задаются в соответствии с распределением Максвелла при удвоенной температуре. Температура образца задается удвоенной, так как задается только кинетическая энергия образца, затем при релаксации часть кинетической энергии перейдет в потенциальную энергию, и температура станет равной  $T$ .

Для упрощения решения системы дифференциальных уравнений задаются периодические граничные условия по всем трем осям. Для периодических граничных условий по оси  $Ox$  это означает, что частица, вышедшая через правую границу образца, заменяется на частицу, имеющую такую же скорость, но вошедшую через левую границу. В дальнейшем система ОДУ (1) решается с помощью конечно-разностной схемы Верле [20]. В этом методе координаты частиц вычисляются на целых временных слоях, а скорости — на полуслоях.

## 3. ПОТЕНЦИАЛ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ЧАСТИЦ

Основной задачей является выбор силы взаимодействия между частицами. Именно от потенциала зависит точность и достоверность дальнейших результатов. Параметры потенциала выбираются так, чтобы описать некоторые реальные процессы с определенной степенью точности. Тогда имеется большая вероятность, что моделирование других процессов также будет хорошо описывать реальные. В данной работе для определения термодинамических свойств золота использовался потенциал «погруженного атома» (EAM) [17]. Потенциал построен на основе, как экспериментальных данных, так и полученных из первопринципных методов. Результаты тестирования потенциала на золоте показали его надежность и хорошее совпадение с данными эксперимента [17].

## 4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Для удобства дальнейшего использования результаты вычислений аппроксимируются полиномами  $P_m$  степени  $m$ :

$$P_m(x) = \sum_{k=0}^m a_k x^k, \quad (2)$$

где  $a_k$  — коэффициенты полинома.

Погрешность аппроксимации рассчитывалась по критерию наименьших квадратов [21]:

$$\Delta(P_m(x_j), y_j) = \sqrt{(1/n + 1) \sum_{j=0}^n (P_m(x_j) - y_j)^2} \rightarrow \min, \quad (3)$$

где  $y_j$  — дискретное множество значений функции, полученных из результатов МД вычислений для аргумента  $x_j$  ( $j = 0, \dots, n$ ).

### 2.1. Равновесная температура плавления

Определение барической зависимости равновесной температуры плавления золота осуществлялось при помощи эксперимента, основанного на сосуществовании твердой и жидкой фаз в расчетной области. Расчетная область выбиралась в виде параллелепипеда, с размерами  $20 \times 10 \times 10$  элементарных ячеек. Золото имеет гранецентрированную кубическую решетку с постоянной кристаллической решетки 0.406 нм. Общее число частиц в заданной области равнялось 8000. По всем трем осям задаются периодические граничные условия. Вначале вычисляется приблизительное значение температуры плавления (при выбранном давлении), при нулевом давлении оно оказалось равно 1320 К. До этой температуры нагревается весь образец. Затем образец

делится на две половины, одна из них будет оставаться в твердом виде, а вторую представим в виде жидкости. Для этого термостатом поддерживается температура одной части образца 1320 К, а другая часть нагревается до  $T = 2000$  К. При температуре 2000 К вся половина расплывется и превратится в жидкость. Далее жидкость охлаждается термостатом до температуры  $T = 1320$  К, баростат поддерживает требуемое давление. Охлаждение происходит достаточно быстро, чтобы жидкость не успела начать кристаллизоваться. Затем запускается релаксационный расчет с выключенным термостатом, после чего отключается еще и баростат, и продолжается расчет до установления фазового равновесия. Вначале образец немного нагреется, так как начнет кристаллизоваться. Потом наступит фазовое равновесие, и температура всего образца будет флуктуировать около равновесной температуры плавления. Полученное значение температуры при нулевом давлении равно 1332 К.

Аналогично проводятся расчеты равновесной температуры плавления при других давлениях в диапазоне от 0 до 100 кбар. В каждом случае баростатом задается и поддерживается требуемое давление. На рис. 1 представлен график барической зависимости температуры плавления.

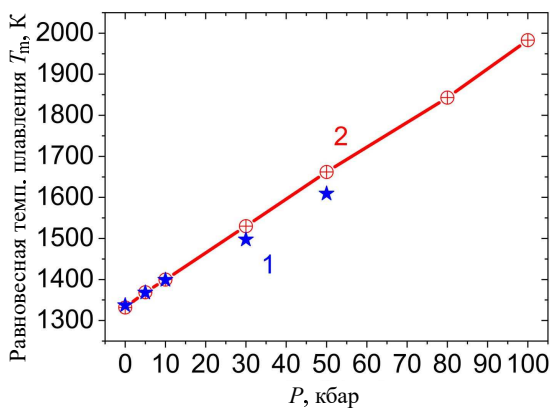


Рис. 1. Барическая зависимость температуры плавления золота. 1 — справочные данные [22], 2 — результаты моделирования

Сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными [22] показывает совпадение при  $0 < P < 10$  кбар. При более высоком давлении результаты моделирования отличаются на несколько процентов: при  $P = 30$  кбар отличие составляет  $\sim 1.9\%$ , при  $P = 50$  кбар —  $\sim 3\%$ . Полученные данные для равновесной температуры плавления  $T_m$  аппроксимируются полиномами первой степени.

$$\tilde{T}_m(P) = a_0 + a_1 \times P$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) пред-

ставлены в табл. 1.

Таблица 1. Значения коэффициентов аппроксимирующей функции  $\tilde{T}_m(P)$  и величина погрешности аппроксимации

$k$	$a_k$
0	1332
1	6.489
$\Delta(\tilde{T}_m(P_j), T_{m,j}), \text{К}$	3.662

## 2.2. Удельная теплота плавления

Удельная теплота плавления золота вычислялась как разность энтальпий твердой и жидкой частей при одной и той же температуре и давлении. Эксперимент проводился следующим способом. Выбираются две кубические области с размерами  $15 \times 15 \times 15$  элементарных ячеек. В каждой области содержится 13500 частиц, в расчетах используются периодические граничные условия.

Вначале проводится релаксация первого образца при 300 К и нулевом давлении. Далее образец нагревается с помощью термостата до температуры плавления при нулевом давлении  $T_m = 1332$  К. Баростат поддерживает нулевое давление. Затем производится релаксационный расчет с включенным баростатом, при этом вычисляется энтальпия системы. Значения энтальпии осциллируют около среднего значения энтальпии твердого тела.

Затем вычисляется энтальпия жидкости. Второй образец, после релаксации, нагревается до 2000 К. При этой температуре весь образец превращается в жидкость. Затем быстро охлаждается до температуры плавления 1332 К. Охлаждение происходит быстро, чтобы образец остался жидкостью. Баростатом поддерживается нулевое давление. Далее запускается релаксационный расчет, энтальпия системы вычисляется в каждый момент времени, находится ее среднее значение.

Удельная теплота плавления вычисляется как разность энтальпий для твердого тела и жидкости. Расчеты повторялись для других значений давления, заданного и поддерживаемого баростатом в диапазоне от 0 до 100 кбар.

В табл. 2 показаны полученные из МД вычисленные значения теплоты плавления золота в зависимости от давления. Известно экспериментальное значение [22] только при нулевом давлении, которое равно  $L_m = 12.680$  кДж/моль. Для нулевого давления значение, полученное с помощью моделирования, равно  $L_m = 12.894$  кДж/моль, отличается от справочного значения на  $\sim 1.7\%$ . Для других давлений экспериментальных значений не известно.

Таблица 2. Значения  $L_m(P)$ , полученные с помощью моделирования и экспериментальное значение

$P$ , кбар	$L_m$ , кДж/моль	$L_m$ , кДж/моль, эксперимент [22]
0	12.894	12.68
10	13.317	
30	14.216	
50	14.976	
80	16.156	
100	17.016	

Барическую зависимость удельной теплоты плавления золота  $L_m(P)$  аппроксимируем линейной зависимостью.

$$\tilde{L}_m(P) = a_0 + a_1 \times P$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) представлены в табл. 3.

Таблица 3. Значения коэффициентов аппроксимирующей функции  $\tilde{L}_m(P)$  и величина погрешности аппроксимации

$k$	$a_k$
0	12.894
1	0.041
$\Delta(\tilde{L}_m(P_j), L_{m,j})$ , кДж/моль	0.04

### 2.3. Плотность и теплоемкость

Вычисление плотности, энтальпии и удельной теплоемкости золота производится в рамках одного и того же вычислительного эксперимента. Образец задается в кубической форме, содержащий  $30 \times 30 \times 30$  элементарных ячеек, что соответствует 108000 частиц. Размер области выбирается так, чтобы не возникали слишком большие флуктуации. Вначале проводится релаксация частиц образца 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 5000 К, необходимой для полного расплава образца. При нагревании вычисляется энтальпия (в дальнейшем с ее помощью вычисляется теплоемкость  $C_p$ ), и плотность  $\rho$ .

Результаты моделирования плотности золота в диапазоне от 300 К до 5000 К представлены на рис. 2.

На рис. 2 также показаны данные экспериментов [23, 24]. При одной и той же равновесной температуре ( $T_m = 1332$  К) плотность золота в жидком

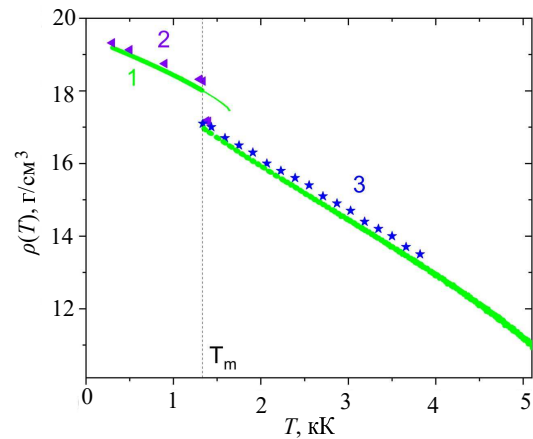


Рис. 2. Температурная зависимость плотности золота. 1 — сплошная линия — результаты МД вычислений; 2–3 — маркеры — данные экспериментов [23, 24]

состоянии оказывается меньше, чем плотность твердого золота при этой же температуре, т. е. при плавлении плотность золота уменьшается, это подтверждается и справочными данными [24]. Значения плотности в твердой фазе, полученные из моделирования, максимально отличаются от экспериментальных [23] на  $\Delta\rho \approx 1.7\%$  при  $T = 1330$  К. В жидкой фазе различие с [24] составляет  $\Delta\rho \approx 1\%$  при  $T = T_m$  и  $\Delta\rho \approx 1.5\%$  при  $T = 1910$  К. При фазовом переходе твердое тело-жидкость плотность золота уменьшается. Величина перепада, полученная с помощью моделирования равна  $\Delta\rho \approx 6\%$ , согласно данным эксперимента [23] —  $\Delta\rho \approx 6.4\%$ . На рис. 2 пунктирная линия обозначает перегрев твердой фазы, при нем также заметно уменьшение плотности.

Полученные результаты плотности  $\rho(T)$  аппроксимировались полиномами второй степени отдельно для твердой и жидкой фазы в виде:

$$\tilde{\rho}(T) = a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  и погрешностей аппроксимации по критерию наименьших квадратов (3) представлены в табл. 4.

Таблица 4. Значения коэффициентов аппроксимирующей функции  $\tilde{\rho}(T)$  и величина погрешности аппроксимации

$a_k$	Твердая фаза, $T_0 = 300$ К	Жидкая фаза, $T_0 = 1332$ К
$a_0$	19.186	16.992
$a_1$	$-9.55 \times 10^{-4}$	$-1.68 \times 10^{-3}$
$a_2$	$-1.73 \times 10^{-7}$	$1.593 \times 10^{-7}$
$\Delta(\tilde{\rho}(T_j), \rho_j)$ , г/см³	0.00361	0.0085



Также в ходе описанного выше эксперимента вычислялась температурная зависимость энтальпии  $H$  в диапазоне от 300 К до 5000 К. Значения энтальпии, полученные в результате МД вычислений, были аппроксимированы отдельно для твердой и жидкой фаз полиномами  $\tilde{H}(T)$  (2) невысоких степеней  $m = 5$  для твердой фазы и  $m = 3$  для жидкой. Ошибка аппроксимации энтальпии составила  $0.53 \times 10^{-3}$  Дж/моль в твердой фазе и  $1.5 \times 10^{-3}$  Дж/моль в жидкой фазе. Теплоемкость для каждой фазы определялась дифференцированием энтальпии  $\tilde{H}(T)$ :

$$C_p(T) = \frac{\partial \tilde{H}(T)}{\partial T}.$$

График теплоемкости представлен на рис. 3. Результаты вычислений МД представлены на рис. 3 и отмечены экспериментальные результаты [25, 26]. Вертикальная пунктирная линия соответствует равновесной температуре плавления  $T_m = 1332$  К золота.

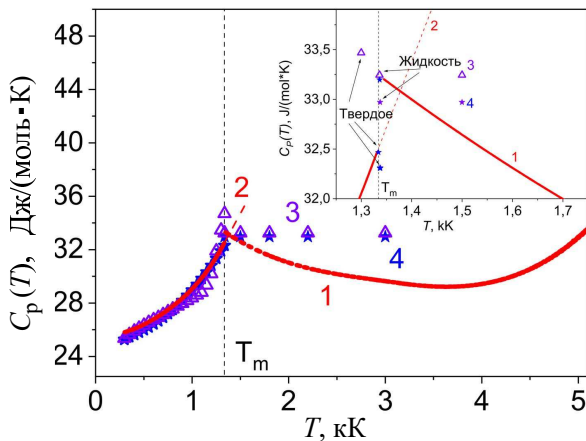


Рис. 3. График температурной зависимости теплоемкости золота, сплошная линия - результаты моделирования, маркеры - результаты экспериментов [25, 26]

Теплоемкость золота для твердой и жидкой фаз получена в виде полиномов 4-й и 2-й степени

$$C_{P,sol}(T) = a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2 + a_3(T - T_0)^3 + a_4(T - T_0)^4,$$

$$C_{P,liq}(T) = a_0 + a_1(T - T_0) + a_2(T - T_0)^2.$$

Значения коэффициентов  $a_k$  представлены в табл. 5. В твердой фазе с ростом температуры значение теплоемкости растет, что соответствует экспериментальным данным. В твердой фазе максимальное отличие полученных результатов от данных из работы [25] равно  $\Delta C_p \approx 3.65\%$  при температуре  $T \approx 1100$  К. С данными [26] максимальное отличие  $\Delta C_p \approx 2.1\%$  при температуре  $T \approx 300$  К. Таким образом, результаты моделирования практически совпадают с результатами других авторов.

Таблица 5. Значения коэффициентов функции  $C_p$

$a_k$	Solid, $T_0 = 300$ K	Liquid, $T_0 = 1332$ K
$a_0$	25.81531	33.25141
$a_1$	$2.07 \times 10^{-3}$	$-3.79 \times 10^{-3}$
$a_2$	$4.74279 \times 10^{-6}$	$1.037 \times 10^{-6}$
$a_3$	$-3.69019 \times 10^{-9}$	
$a_4$	$3.11463 \times 10^{-12}$	

При фазовом переходе твердое тело-жидкость ( $T_m = 1332$  К) теплоемкость меняется скачкообразно. Теплоемкость твердой фазы меньше теплоемкости жидкости на  $\Delta C_p \approx 2.1\%$ . По результатам работы [26] величина скачка  $\Delta C_p \approx 2\%$ , в работе [25] замечен перепад в обратную сторону и  $\Delta C_p \approx -4.3\%$ .

В жидкой фазе в работах [25, 26] известны значения при температуре плавления  $C_p \approx 33.24$  Дж/моль·К и  $C_p \approx 32.97$  Дж/моль·К соответственно, и затем это значение становится постоянным до 3000 К. Однако значение теплоемкости должно меняться при увеличении температуры. В данной работе температурная зависимость теплоемкости представляет собой полиномиальную зависимость, которая с ростом температуры уменьшается.

Проведенное сравнение теплоемкости с результатами работ других авторов показывают хорошее совпадение на всем температурном диапазоне.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Методом молекулярно-динамического моделирования с использованием потенциала взаимодействия частиц ЕАМ получены барические зависимости равновесной температуры плавления и удельной теплоты плавления золота в диапазоне от 0 до 100 кбар. Отличие равновесной температуры плавления от экспериментальных значений составляет около 3%, у удельной теплоты плавления — 1.7%.
2. Получены температурные зависимости плотности, энтальпии и удельной теплоемкости в широком диапазоне от 300 К до 5000 К. Данный промежуток включает в себя точку плавления и окологритическую область. В точке плавления  $T_m = 1332$  К вычислены значения плотности и теплоемкости для твердого и жидкого состояния золота. Плотность на фазовом переходе первого рода (плавление) уменьшается и величина перепада составляет  $\Delta \rho \approx 6\%$  в. Теплоемкость при фазовом переходе увеличивается и  $\Delta C_p \approx 2.1\%$ .
3. Для описанных теплофизических характеристик получены полиномиальные зависимости.
4. Проведенное сравнение моделирования с результатами экспериментов и работами других авто-

ров, использовавших различные методы, показывает хорошее совпадение.

5. Метод молекулярно-динамического моделирования с потенциалом ЕАМ описывает построенные модели с допустимой точностью и в дальнейшем может быть применим для моделирования импульсной лазерной абляции вещества, причем найденные зависимости и величины могут быть использованы как входные данные для модели.

Автор выражает благодарность профессору доктору физ.-мат. наук В.И. Мажукину, канд. физ.-мат. наук О.Н. Королевой и канд. физ.-мат. наук М.М. Демину.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант: 19-07-01001.

Статья была представлена на Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов-2021» и рекомендована к печати.

- [1] *Shafeev G.A., Rakov I.I., Ayyzyzhy K.O., Mikhailova G.N., Troitskii A.V., Uvarov O.V.* // Applied Surface Science. 2019. **466**. P. 477.
- [2] *Khan A.K., Rashid R., Murtaza G., Zahra A.* // Journal of Pharmaceutical Research. 2014. **13**, N 7. P. 1169.
- [3] *Xue X., Liang X.-J., Ge Y.* et al. (Eds.) Nanomedicine, Nanostructure Science and Technology. Springer Science+Business Media. New York, 2014. V. 1. pp. 101–115.
- [4] *Elahi N., Kamali M., Baghersad M. H.* // Talanta. 2018. **184**. P. 537.
- [5] *Zhang X.* // Springer. 2015. **72**, N 3, P. 771.
- [6] *Duncan B., Kim C., Rotello V.M.* // Journal of Controlled Release. 2010. **148**. P. 122.
- [7] *Cai W., Gao T., Hong H., Sun J.* // Nanotechnology, Science and Applications. 2008. **1**. P. 17.
- [8] *Kabashin A. V., Meunier M.* // J. of Appl. Phys. 2003. **94**, P. 7941.
- [9] *Barcikowski S., Hahn A., Kabashin A.V., Chichkov B.N.* // Appl. Phys. A. 2007. **87**, P. 47.
- [10] *Sadrolhosseini A. R., Mahdi M. A., Alizadeh F., Suraya R. A.* // Laser Technology and its Applications. Yufei Ma. (Ed.), InTech, 2020. chapter 4.
- [11] *Koroleva O.N., Demin M.M., Mazhukin V.I., Mazhukin A.V.* // Mathematical Montisnigri. 2019. **45**. P. 85.
- [12] *Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A., Voter A. F., Kress J. D.* // Phys. Rev. B. 2001. **63**. 224106.
- [13] *Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* // Phys. Rev. B. 1986. **33**, N 12. P. 7983.
- [14] *Koroleva O.N., Demin M.M., Mazhukin V.I., Mazhukin A.V.* // Mathematical Montisnigri. 2019. **45**. P. 85.
- [15] *Mazhukin V.I., Shapranov A.V., Perezhigin V.E., Koroleva O.N., Mazhukin A.V.* // Math. Models Comput. Simul. 2017. **9**, N 4. P. 448.
- [16] *Mazhukin V.I., Demin M.M., Aleksashkina A.A.* // Mathematical Montisnigri. 2018. **41**. P. 99.
- [17] *Zhakhovskii V.V., Inogamov N.A., Petro Yu.V., Ashitkov S.I., Nishihara K.* // Appl. Surf. Sci. 2009. **255**. P. 9592.
- [18] *Plimpton S.* // J. Comput. Phys. 1995. **117**, N 1. P. 1.
- [19] *Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., Van Gunsteren W.F., DiNola A., Haak J.R.* // J. Chem. Phys. 1984. **81**. P. 3684.
- [20] *Verlet L.* // Phys. Rev. **159**. 1967. P. 98.
- [21] *Самарский А.А., Гулин А.И.* Численные методы. М.: Физматлит, 1989.
- [22] Справочник под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. Физические величины. М.: Энергоатомиздат, 1991.
- [23] *Зиновьев В.Е.* Теплофизические свойства металлов при высоких температурах. «Металлургия», 1989.
- [24] *Wilde G., Mitsch C., Gijrler G.P., Willnecker R.* // Journal of Non-Crystalline Solids. 1996. **205**. P. 425.
- [25] *Tester J.W., Feber R.C., Herrick C.C.* // J. Chem. Eng. Data. 1968. **13**, N 3. P. 419.
- [26] *Arblaster J.W.* // J. Phase Equilibria Diffusion. 2016. **37**. P. 229.

## Molecular dynamic modeling of thermophysical properties of gold

A. A. Aleksashkina

<sup>1</sup>Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences (KIAM RAS)

Moscow, 125047 Russia

E-mail: ann-tr@yandex.ru

Gold thermodynamic properties were examined by molecular dynamics with use of the embedded atom model. The LAMMPS package was used. Equilibrium melting temperature and specific heat as function of pressure were determined in range from 0 to 100 kbar. Density and specific heat as function of temperature were determined in range from 300 to 5000 K that included melting region. The modeling results were consistent with those from other authors both experimental and determined with other methods. These dependences and quantities can be used as input data for the continuum model of pulsed laser heating of matter.

PACS: 02.70.Ns

**Keywords:** Molecular-dynamic modeling, Potential of the embedded atom method (EAM), thermophysical properties of gold, melting-crystallization region, phase transition.

Received 15 July 2021.

### Сведения об авторе

Алексашкина Анна Андреевна — мл. науч. сотрудник; e-mail: ann-tr@yandex.ru.