



Smulación de Ondas de Choque

Gonzalo Gutiérrez
Departament of Physics
Uníversidad de Chile.

gonzalo@fisica.ciencias.uchile.cl
<http://fisica.ciencias.uchile.cl/~gonzalo>

Teoría ondas de choque

- **IDEA:**

- **Gases:** se puede hacer un desarrollo bastante completo sobre las ondas de choque
 - Básicamente se escriben ecuaciones de conservación de masa, momentum y energía para adelante y atrás del frente de ondas y luego se ocupa la ecuación de estado (EOS) del material para obtener las relaciones termodinámicas (ver apuntes L. Moraga).
- **Líquidos y sólidos:** acá uno de los problemas es que no se conoce la ecuación de estado en forma general.

Simulación ondas de choque

- **IDEA:**
 - A) Usar relaciones de Hugoniot:
 - Materia en condiciones extremas: **Se necesita conocer EOS**
 - Simulación mediante método de Montecarlo (~1950)
 - Dinámica molecular (~1960)
 - B) Calcular (o simular) el proceso en toda su complejidad
 - Ecuaciones del continuo tipo Navier-Stokes, incorporando términos de mayor orden (Burnett, etc)
 - Simulaciones de Dinámica Molecular

Molecular Dynamic: moving the atoms

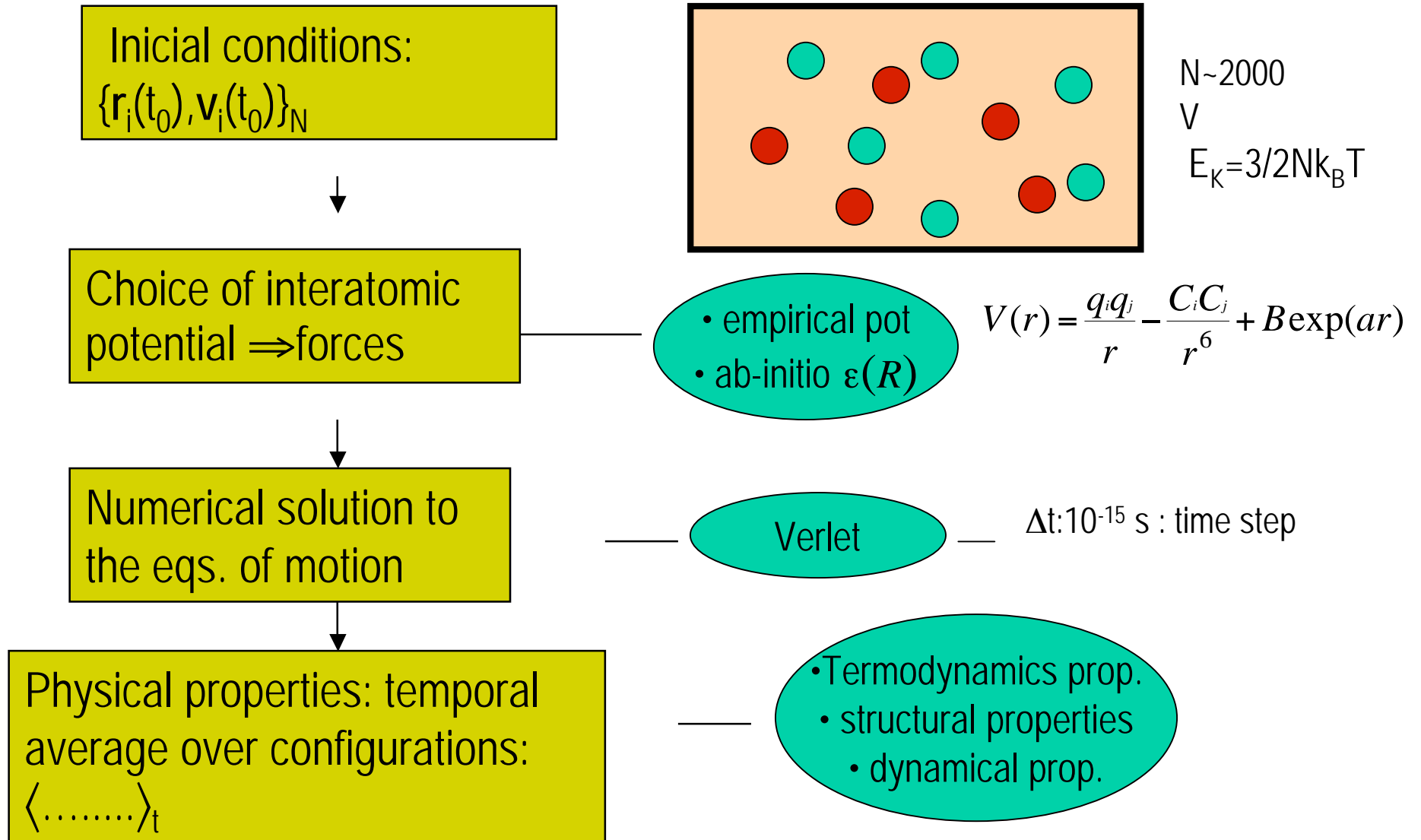
- **IDEA:** atoms “are” classical particles, they follow Newton laws

Interatomic potential $V(r)$ $\vec{F} = -\nabla V(r_1, \dots, r_N)$

Temperature : equipartition theorem $T = \langle mv^2 / 3k \rangle$

- **Numerical solution** of the coupled ordinary differential equations
- **Results:** $r_1(t), \dots, r_N(t); v_1(t), \dots, v_N(t)$
- **Physical properties:** average over configurations, like in statistical mechanics

Molecular Dynamic program



Interatomic potentials

A general expression for an interatomic potential should contain one-body, two body, three body,...and N body terms

$$V = \sum_{i=1}^N v_1(\vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j}^N v_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i=1}^N \sum_{i \neq j}^N \sum_{i \neq j \neq k}^N v_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots$$

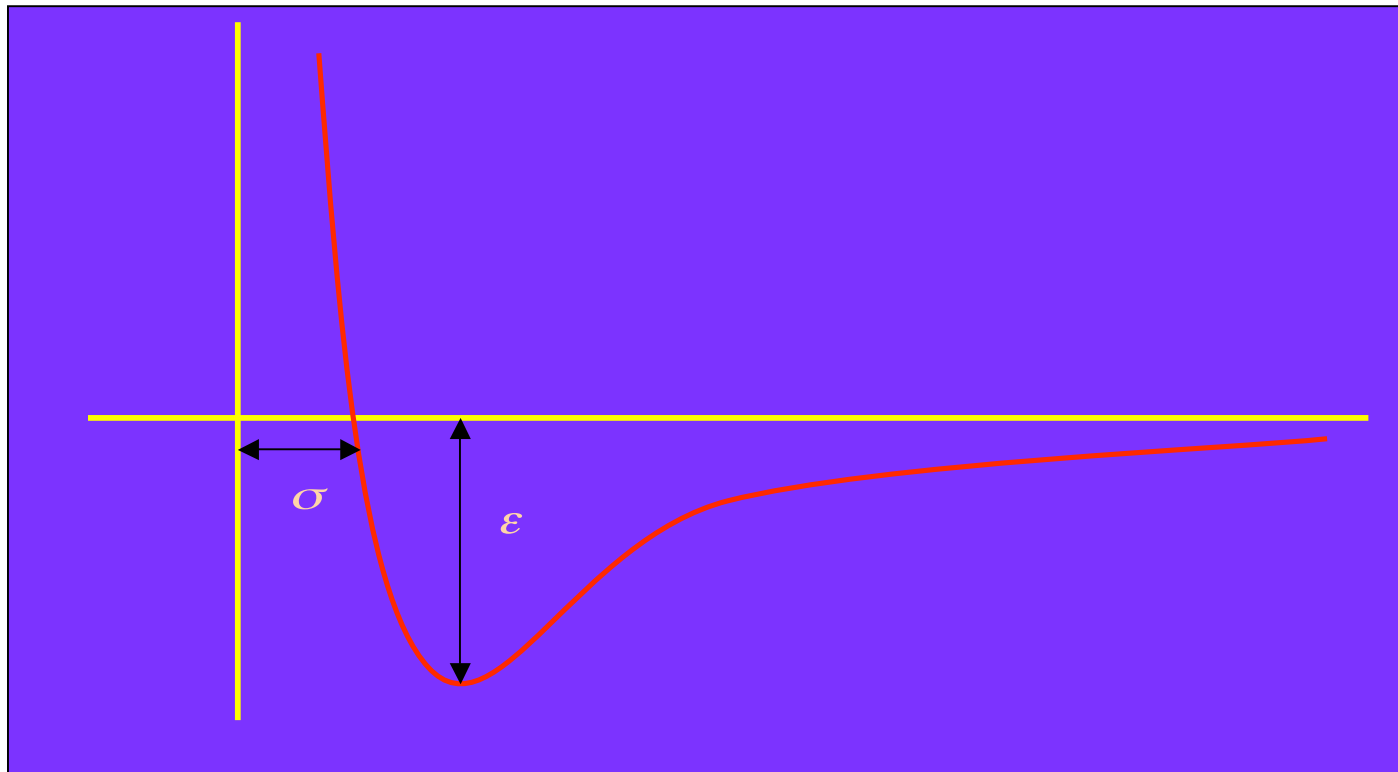
For simplicity, people in general use only two and three body terms.

The idea is to write a general functional form and to fit it according to some experimental data: elastic constants, vacancy energy, etc.

Simple interatomic potential

Ex: Lennard-Jones potential: good for noble gases

$$\Phi(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]$$



Interatomic potential II

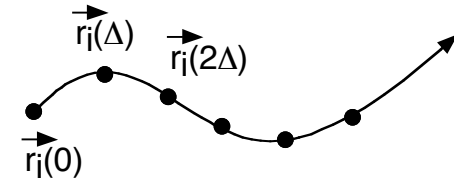
A good interatomic potential should have the following properties

- **FLEXIBILITY**
- 2. **PRECISION**
- 3. **TRANSFERABILITY**
- 4. **COMPUTATIONAL EFFICIENCY**

DM algorithm

Time discretization

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \Delta) = \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t)\Delta + \frac{1}{2}\vec{a}_i(t)\Delta^2 \\ \vec{v}_i(t + \Delta) = \vec{v}_i(t) + \frac{\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \Delta)}{2}\Delta \end{cases} \quad \vec{a}_i = -\frac{1}{m_i} \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_i}$$



Time stepping: Velocity Verlet algorithm

Given $(\vec{r}_i(t), \vec{v}_i(t))$

1. Compute $\vec{a}_i(t)$ as a function of $\{\vec{r}_i(t)\}$
2. $\vec{v}_i(t + \frac{\Delta}{2}) \leftarrow \vec{v}_i(t) + \frac{\Delta}{2}\vec{a}_i(t)$
3. $\vec{r}_i(t + \Delta) \leftarrow \vec{r}_i(t) + \vec{v}_i(t + \frac{\Delta}{2})\Delta$
4. Compute $\vec{a}_i(t + \Delta)$ as a function of $\{\vec{r}_i(t + \Delta)\}$
5. $\vec{v}_i(t + \Delta) \leftarrow \vec{v}_i(t + \frac{\Delta}{2}) + \frac{\Delta}{2}\vec{a}_i(t + \Delta)$

Physical Properties

Structural properties: pair distribution function $g(r)$
static structure factor $S(q)$

Thermodynamics properties: pressure, heat capacity, etc

Example:
$$p = \frac{kT}{V} - \frac{1}{3V} \sum_{i,j}^N r_{ij} \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}}$$

Dynamical properties diffusion coefficient D
Velocity autorrelation function $VACF(t)$
Vibrational density of states $D(\omega)$

Simulaciones Argón

Densidad: 1,4 g/cm³

Temperatura 5 K

$V_S \sim 1,5$ km/s

N atomos 17280

$L_x=L_y= 34$ A; $L_z= 680$ A

V_p 0,5; 0,7;

Fractura de argón mediante ondas de choque

Fractura en argón por medio de ondas de choque

Session (A)

Claudia Loyola¹, Joaquín Peralta¹, Sergio Davis², Gonzalo Gutiérrez¹

¹Departamento de Física, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile

²Department of Material Science, Royal Institute of Technology, Suecia

claudial.81@gmail.com, Grupo de NanoMateriales, www.gnm.cl

Los efectos del paso de una onda de choque en argón sólido son estudiados por medio de simulación de dinámica molecular [1]. El argón se modela a través de una celda ortorrómbica de lados 34,2382Å y 684,764Å, que contiene 17.280 átomos a una temperatura de 5 K, los cuales interactúan por medio de un potencial de pares [2].

Para reproducir la onda de choque, se golpea un extremo de la caja con un pistón cuya velocidad fluctúa entre 1.2 y 1.3 veces la velocidad del sonido en el argón. Los resultados obtenidos presentan un buen acuerdo con la curva de Hugoniot.

Los efectos de la onda de choque en el sólido son estudiados a través de perfiles de densidad y temperatura, así como también cuantificando la inter-difusión de las partículas.

Nuestros resultados indican que el paso de la onda de choque produce defectos puntuales en el sólido. Al detenerse el pistón se genera una onda de rarefacción que al pasar por los defectos licúa el material. Si la presión negativa que se produce en esta zona excede el esfuerzo de tracción entonces se produce una fractura, separándose el material en dos o más partes.

En la presentación se mostrarán simulaciones que permiten visualizar este fenómeno para ondas de choque de distintas velocidades. En la Fig. 1 se muestra como avanza la onda de choque sobre el material.

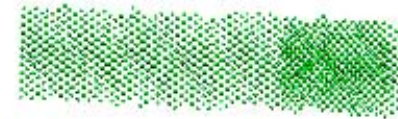


Figura 1 Parte de la celda de simulación que muestra el avance la onda de choque a través del argón sólido.

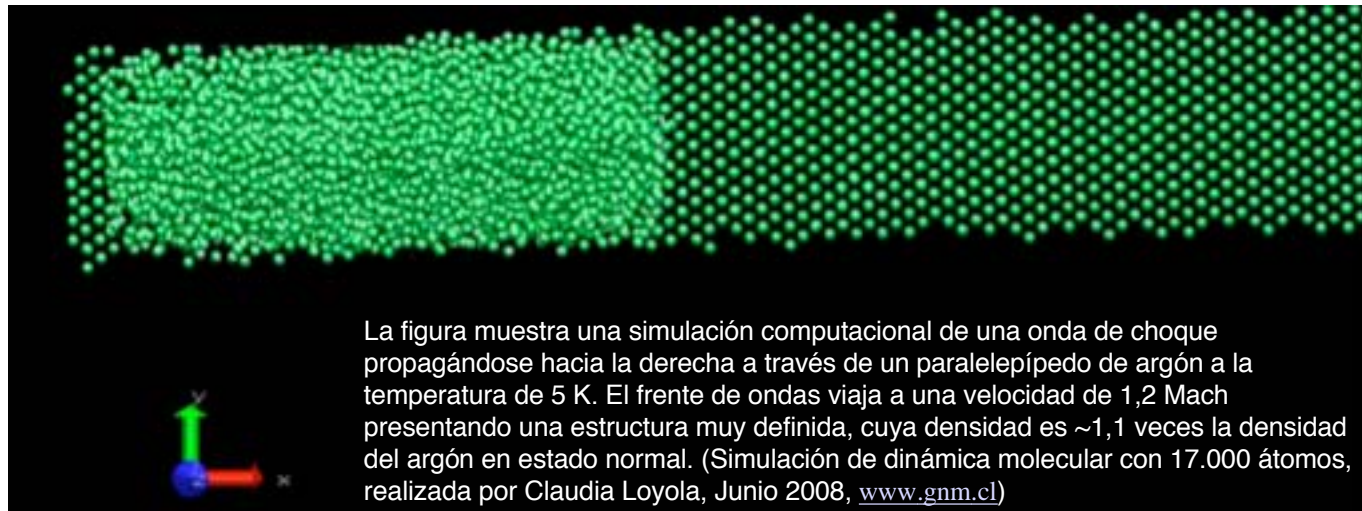
Claudia Loyola agradece a Beca de Doctorado CONICYT. Este trabajo es realizado gracias al Proyecto Anillo Bicentenario-Chile ACT/24 "Computer Simulation Lab for nanobio systems".

Referencias

- [1] Las simulaciones se realizaron con el código *Las Palmeras Molecular Dynamics*, desarrollado por los autores (JP,CL,SD). Ver www.gnm.cl/lpmd
- [2] M. Ross, *Phys. Rev. A* **8**, 1466 (1973).

Simulaciones Argón: animación

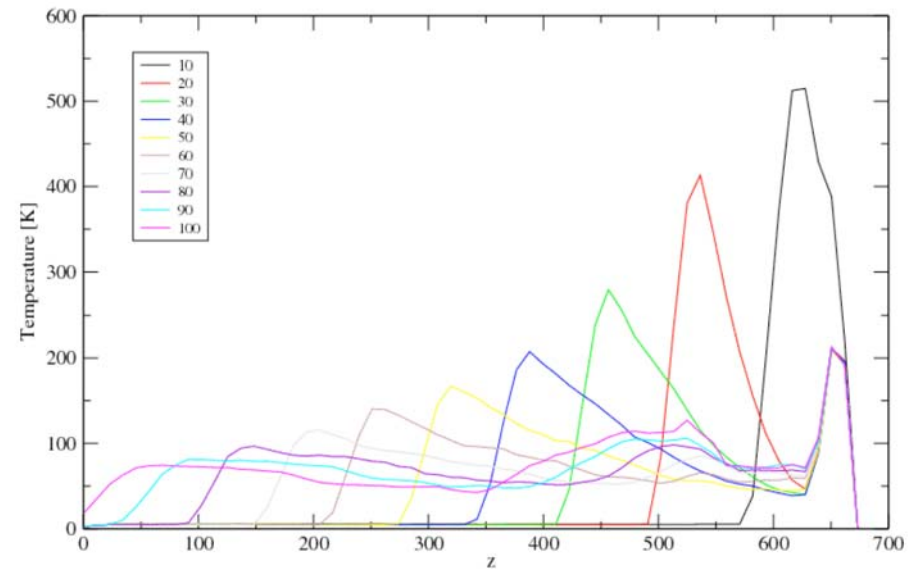
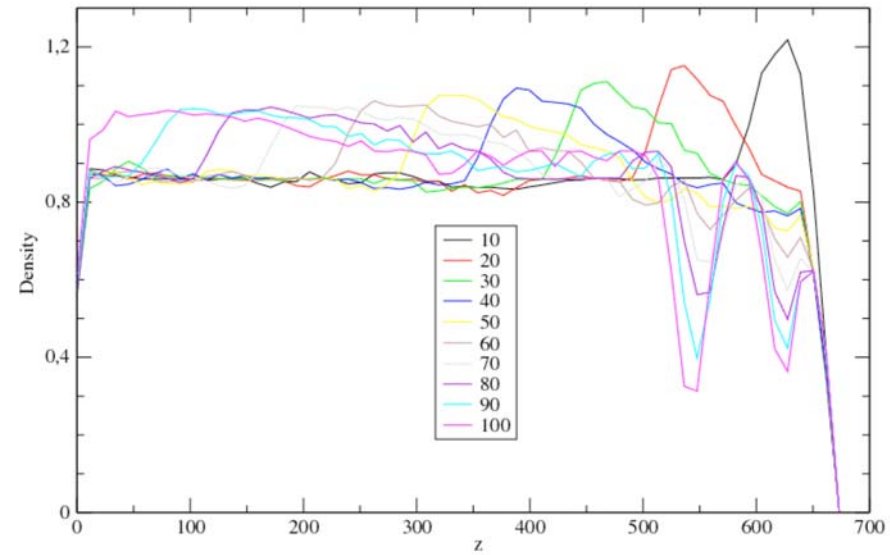
13



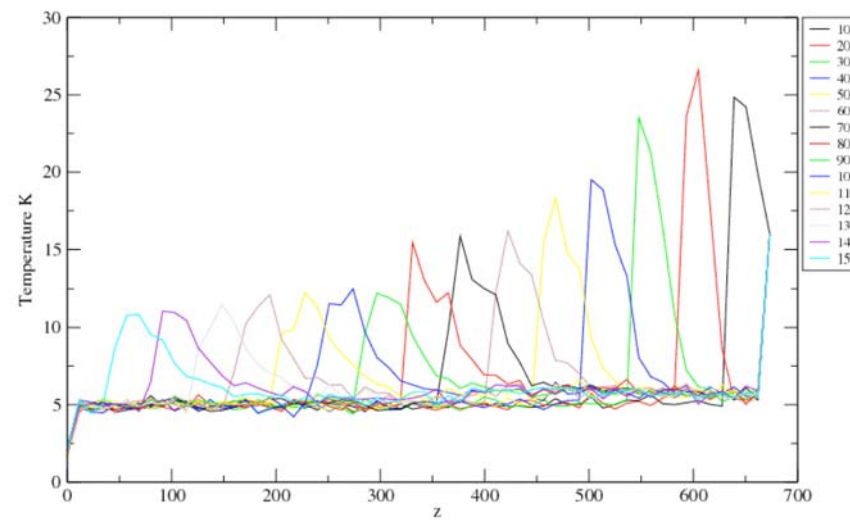
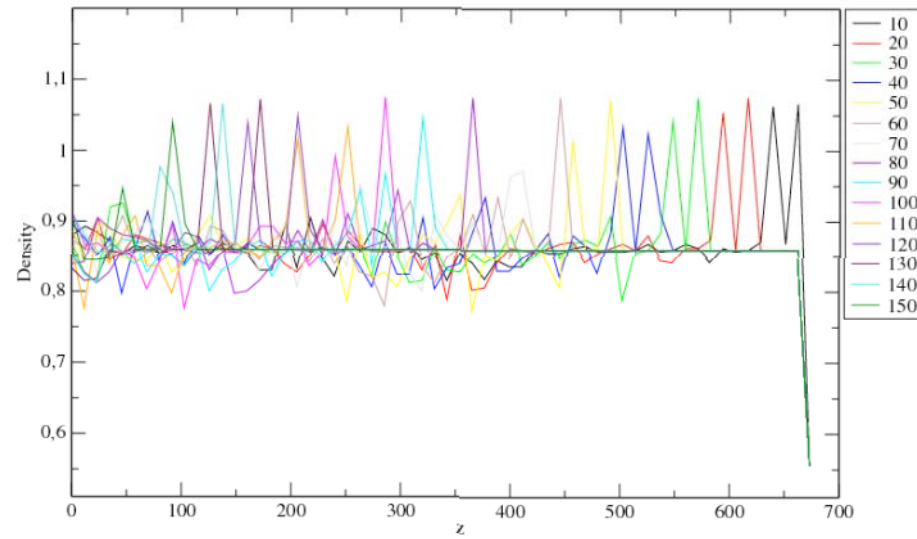
Características principales:

- al propagarse, se produce un deslizamiento de planos en la dirección (111), que produce un desorden en el cristal
- al parar el piston, se produce una onda de rarefacción
- esta onda de rarefacción, al pasar por partes donde existen defectos puntuales, funde localmente la zona (presión negativa) y finalmente se fractura el material. (ver gráficos a continuación).

Simulaciones Argón $V_p=0.5$ km/s



Simulaciones Argón $V_p=0.1$ km/s



ab-initio MD: ions + electrons

The only interaction there exists is the Coulomb interactions!

The idea of ab-initio MD is to calcul everything from the solid state hamiltonian

1. **Electronic structure calculation** to obtain the total energy $e(\mathbf{R})$ in terms of the positions of the ions.
2. **Forces** for each Δt , forces are obtained from the electronic str. calc.

$$\begin{aligned}
 F_I &= -\frac{\partial}{\partial R_I} \varepsilon(\{\mathbf{R}\}) = -\frac{\partial}{\partial R_I} E_{KS}(\{\varphi_i\}, \{\mathbf{R}_i\}) \Rightarrow \\
 &= -\frac{\partial}{\partial R_I} \sum_i \langle \varphi_i | H_{KS} | \varphi_i \rangle \uparrow = -\sum_i \langle \varphi_i | \frac{\partial}{\partial R_I} H_{KS} | \varphi_i \rangle
 \end{aligned}$$

Teo.Hellman-Feynman

Splitting different characteristics time

- Equation of the system $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$


- Solid state physics hamiltonian:

$$(T_{ion} + T_e + V_{e-e} + V_{e-ion} + V_{ion-ion})\Psi(r_1, \dots, r_N; R_1, \dots, R_M) = E\Psi(r_1, \dots, r_N; R_1, \dots, R_M)$$

- Adiabatic approximation: splitting of the ionics and electronics degree of freedom

$$M_{ion} \sim 2000-10000 m_e \Rightarrow \tau_{ion} \gg \tau_e$$

- Writing $\Psi(r;R) = \Phi(r) \chi(R)$, the problem split in two parts:


 $(T_e + V_{e-e} + V_{e-ion} + V_{ion-ion})\Phi(r_1, \dots, r_N; \{R\}) = \varepsilon(\{R\})\Phi(r_1, \dots, r_N; \{R\})$

 electron

ion \longrightarrow $(T_{ion} + \varepsilon(\{R\}))\chi(R) = E' \chi(R)$

Electrons and ions

Electrons $(T_e + V_{e-e} + V_{e-ion} + V_{ion-ion})\Phi(r_1, \dots, r_N; \{R\}) = \varepsilon(\{R\})\Phi(r_1, \dots, r_N; \{R\})$

• **knowing $\varepsilon(\mathbf{R})$ we can have:**

- Ground state (T=0)
- Crystalline structure and PV diagram
- Elastic, optics, magnetics, etc, properties
- Potential energy surface
- Interatomic potential
- \Rightarrow **interatomic forces**

Iones $(T_{ion} + \varepsilon(\{R\}))\chi(\mathbf{R}) = E'\chi(\mathbf{R})$

This is a quantum problem, but classical physics work pretty well!

- to look for an effective interatomic potential **$\varepsilon(\mathbf{R})$**
- to treat the ions as classical particles, i.e. obeying Newton Laws

Electrons : solution of the Schrödinger Eq.

- **Hamiltonian of a many electrons system:**

$$\left(\sum_{j=1}^N -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 + V_{e-e} + V_{ext} \right) \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = E \Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$$

- To look for the GS by means of a variational method:

$$E_0[\Phi_0] = \text{Min}_{\tilde{\Phi}} \langle \tilde{\Phi} | H | \tilde{\Phi} \rangle$$

$$\tilde{\Phi}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \quad 3N \text{ dimensions trial function}$$

- **Approximate Methods** : one electron selfconsistent equations

Hartree: $\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \phi_1 \dots \phi_N$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Z}{r} + \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' \right) \phi_i = \varepsilon_i \phi_i, \quad \text{con } n(r) = \sum_i |\phi_i|^2$$

Hartree-Fock: $\Phi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det[\phi_1 \dots \phi_{Ni}]$

Density Functional Theory

The electronic density $n(r)$ as the basic variable

Hohenberg-Kohn (1964):

1. The external potential $v(r)$ is totally determined from the electronic density $n(r)$.

$$E[n] = \int n(r)v(r)dr + T[n] + V_{e-e}[n]$$

2. For the trial density $\tilde{n}(r)$ we obtain $E_0 \leq E[\tilde{n}]$

N.B. a) We had a $3N$ variables trial function $\Phi(r_1..r_N)$, but now only a 3 variables trial function $\tilde{n}(r)$

b) DFT gives a strict formulaci3n of the search of the GS from the electronic density $\tilde{n}(r)$.

For example, Thomas-Fermi can be derived from DFT.

Electrons II: Kohn-Sham Eqs.

- Total energy reads as (Kohn & Sham, 1965)

$$E_{\{R\}}[\tilde{n}] = T_s[\tilde{n}] + E_{Hartree}[\tilde{n}] + E_{ext}[\tilde{n}] + E_{xc}[\tilde{n}]$$

- Minimization of $E_{\{R\}}[\tilde{n}]$ is equivalent to solve

Kohn-Sham Eqs.

Selfconsistent solution

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + v_{eff}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \\ v_{eff} = \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}' + V_{ext}(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r}) \\ n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \end{array} \right.$$

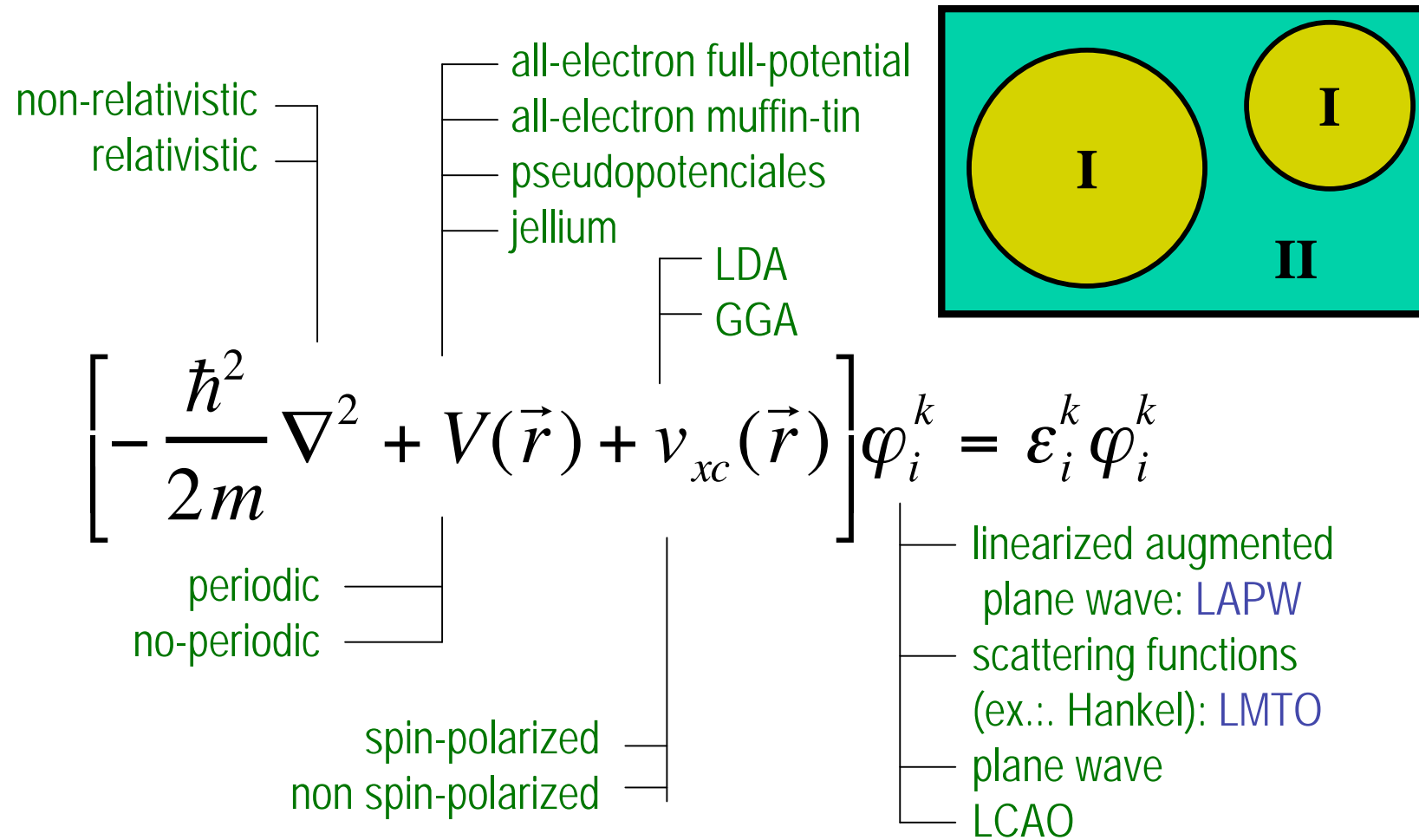
- LDA approximation: $E_{xc}[n] \approx \int n(\vec{r}) \varepsilon_{xc}(n(\vec{r})) d\vec{r}$

with

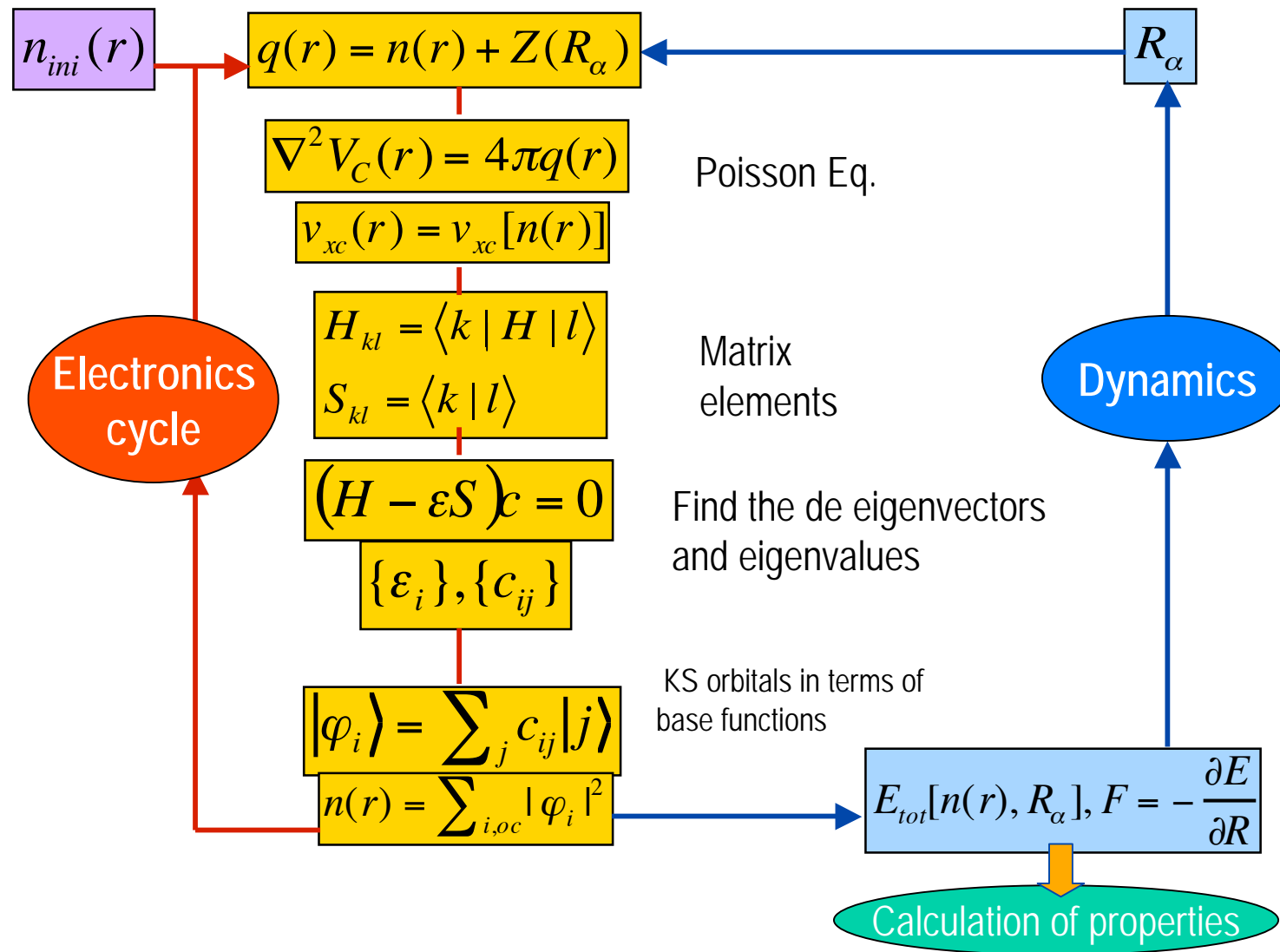
$$\varepsilon_{xc} = -\frac{0.458}{r_s} - \frac{0.44}{r_s + 7.8}$$

homogeneous
electron gas

Electrones III: implementation



Implementation: selfconsistent cycle



Technical issues

- **Input:** crystalline structure, atomic numbers
- **Accuracy** in energy, in forces
- **Full potential calculation:**
 - FPLAPW (Wien2k),
 - FPLMTO
- **Pseudopotential calculation**
 - PPPW method (VASP, CPMD, ABINIT)
 - Other expansion: Gaussian, SIESTA