

Методы восстановления изоэнтроп разгрузки на основе первопринципного моделирования.*М.А. Парамонов^{1,2}, Д.В. Минаков^{1,2}, П.Р. Левашов^{1,2}*¹Объединенный институт высоких температур РАН²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Одной из важнейших задач современной физики остается исследование термодинамических свойств веществ в экстремальных состояниях. Это необходимо как для построения широкодиапазонных уравнений состояния веществ при высоких температурах и давлениях, так и при решении множества прикладных и фундаментальных задач, в том числе в энергетике, космических исследованиях, военной промышленности, астрофизике и физике твердого тела.

Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и изоэнтропическому расширению являются одним из основных источников информации при высоких плотностях энергии, но получение таких данных сопряжено с большими техническими трудностями, а подчас и вовсе невозможно. Развитие вычислительных методов и суперкомпьютеров сделало возможным получение данных о термодинамических свойствах веществ высокой степени достоверности в результате моделирования с использованием первопринципного подхода – метода квантовой молекулярной динамики (КМД).

Задачей данной работы является исследование возможных методов восстановления кривых изоэнтропического расширения на основе данных КМД моделирования. Авторами анализируются точность и вычислительная сложность трех методов: метода Зельдовича [1], метода повторных ударных адиабат и прямого расчета энтропии с использованием 2PT модели [2]. В рамках первого метода численно решается обыкновенное дифференциальное уравнение для температуры. Второй метод основан на свойстве касания второго порядка ударной адиабаты Гюгонио и изоэнтропы разгрузки. Для расчета энтропии в третьем методе используется восстановленная на основе автокорреляционной функции скорости частиц плотность колебательных состояний.

В качестве исследуемого материала выбран алюминий. В работе проведен анализ восстановления изоэнтропы разгрузки, соответствующей экспериментально полученной в работе [3].

В дальнейшем авторами будут проведены расчеты изоэнтроп разгрузки для менее изученных металлов – молибдена и вольфрама.

Результаты данной работы будут интересны широкому кругу исследователей, в особенности, занимающимся первопринципными расчетами термодинамических свойств и созданием широкодиапазонных уравнений состояния.

Литература

- [1] *Zel'dovich Ya.B.* Eksp. Teor. Fiz. 1957. V. 32. P. 1577
- [2] *Lin S. T., Blanco M., Goddard III W. A.* The two-phase model for calculating thermodynamic properties of liquids from molecular dynamics: Validation for the phase diagram of Lennard-Jones fluids //The Journal of chemical physics. 2003. V. 119. N. 22. P. 11792-11805.
- [3] *Knudson M. D., Asay J. R., Deeney C.* Adiabatic release measurements in aluminum from 240-to500-GPa states on the principal Hugoniot //Journal of applied physics. 2005. V. 97. N. 7. P. 073514.