

РАСЧЕТ ИЗОЭНТРОП РАЗГРУЗКИ АЛЮМИНИЯ МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Минаков Д. В., Левашов П. Р., Хищенко К. В.
ОИВТ РАН, Москва

В работе представлены расчеты ударной адиабаты и изоэнтроп разгрузки алюминия методом квантовой молекулярной динамики. Используется пакет программ VASP [1] с псевдопотенциалом PAW [2] и обобщенно-градиентное приближение для обменно-корреляционного функционала. В вычислениях, которые проводились на максимальном числе процессоров 150, использовалось до 108 частиц. Для ударной адиабаты сплошного алюминия уравнение Гюгонио решалось численно. Для расчета изоэнтроп разгрузки использовался метод Зельдовича [3], состоящий в интегрировании обыкновенного дифференциального уравнения для температуры и последующем восстановлении всех термодинамических параметров. Результаты расчетов находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными. Следовательно, данные квантовых молекулярно-динамических расчетов могут быть использованы для калибровки широкодиапазонных уравнений состояния в условиях недостатка экспериментальных данных. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, гранты 08-08-01055 и 09-08-01129.

1. Kresse G., Hafner J. // Phys. Rev. B. 1993. V.47. P.558 (1993); Phys. Rev. B. 1994. V.49. P.14251.
2. Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. B. 1999. V.59. P.1758.
3. Зельдович Я. Б. // ЖЭТФ. 1957. Т.32. С.1577.