



# **РАСЧЕТ УДАРНОЙ АДИАБАТЫ И ИЗОЭНРОПЫ РАЗГРУЗКИ АЛЮМИНИЯ МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ**

Минаков Д.В.<sup>1,2\*</sup>, Левашов П.Р.<sup>1</sup>, Хищенко К.В.<sup>1</sup>

\*minakovd@inbox.ru

<sup>1</sup>Объединенный Институт Высоких Температур РАН

<sup>2</sup>Московский Физико-Технический Институт (НИУ)



# План

- Цель работы
- Алюминий: мотивация
- Квантовая молекулярная динамика
- Ударная адиабата
- Изоэнтропы разгрузки
- Заключение



# Цель работы

Рассчитать ударную адиабату и  
изоэнтропы разгрузки без  
привлечения экспериментальных  
данных



# Алюминий: мотивация

- Алюминий относительно прост для расчета (всего 3 валентных электрона, глубоколежащий кор)
- Большое количество экспериментальных данных



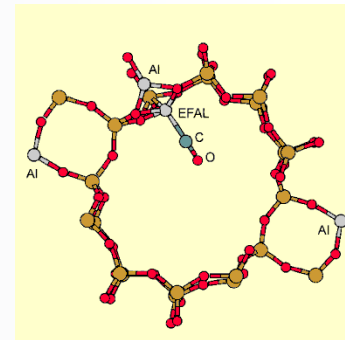
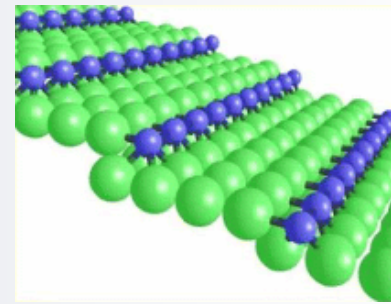
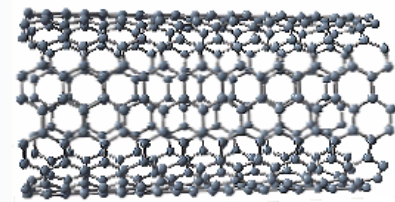
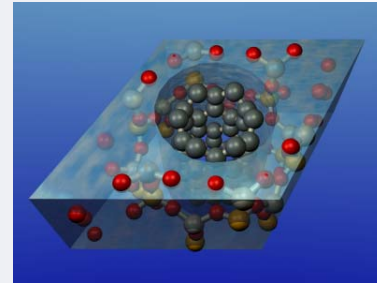
# Квантовый расчет (ожидания)

- Различные свойства веществ
  - УРС
  - Транспортные свойства  $\varepsilon(\omega, \rho, T)$ ,  $\kappa(\rho, T)$
  - Оптические свойства
- Может заменить экспериментальные данные или дать дополнительные данные в области высоких температур и давлений



# VASP

## 1. VASP – псевдопотенциальный подход



G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993); **49**, 14251 (1994).  
G. Kresse and J. Furthmuller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).

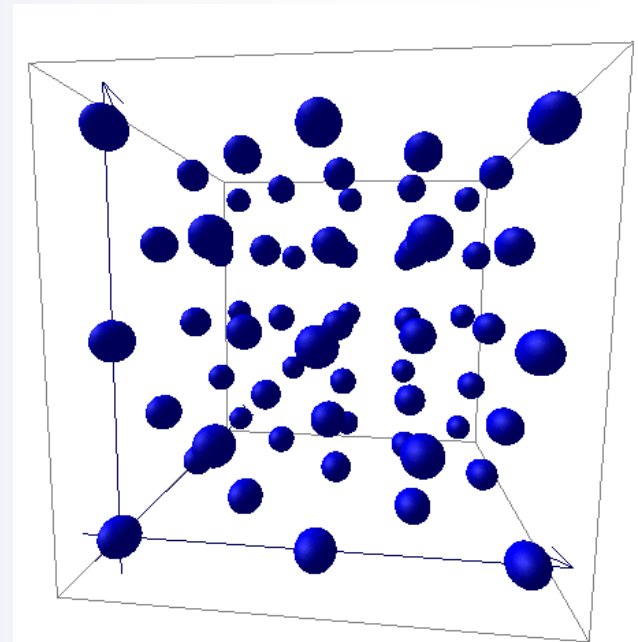


# Квантовая молекулярная динамика (КМД)

- Электроны - квантовые; описываются в рамках теории функционала плотности
- Ионы - классические; двигаются под действием сил со стороны электронов в соответствии с законами Ньютона

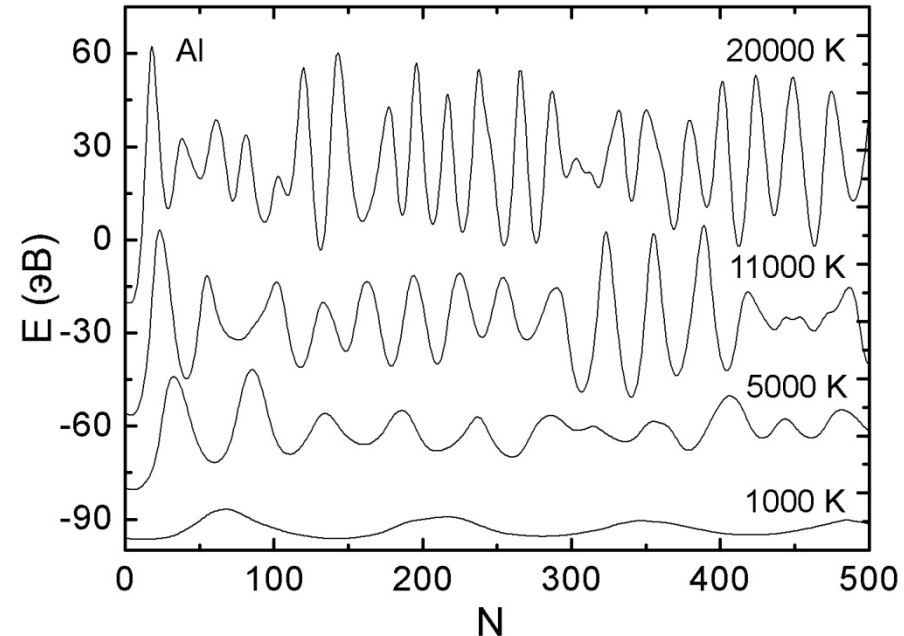
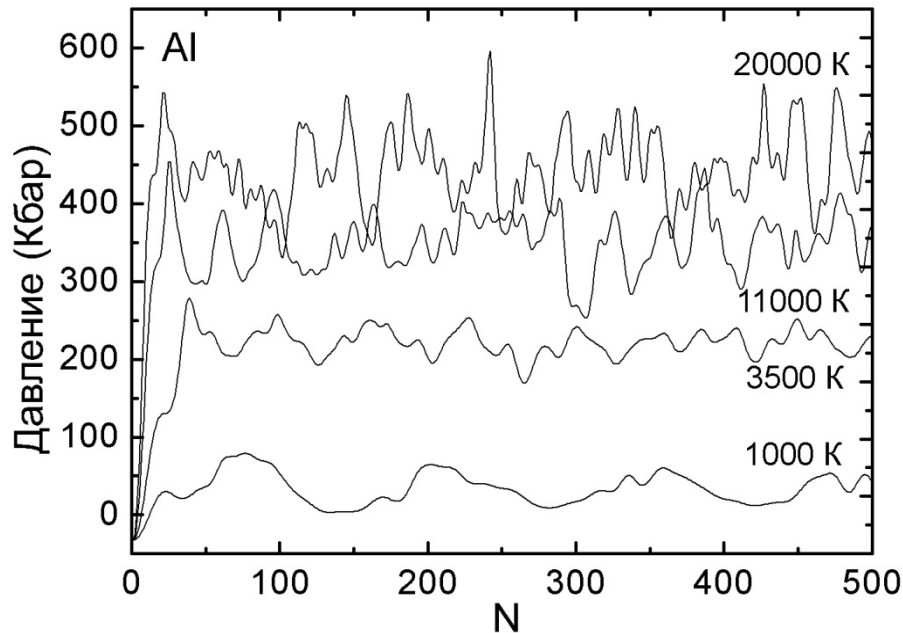


Визуализация  
КМД-расчета  
для 32 частиц Al  
при  $T=3000\text{K}$





# КМД. Эволюция давления и энергии

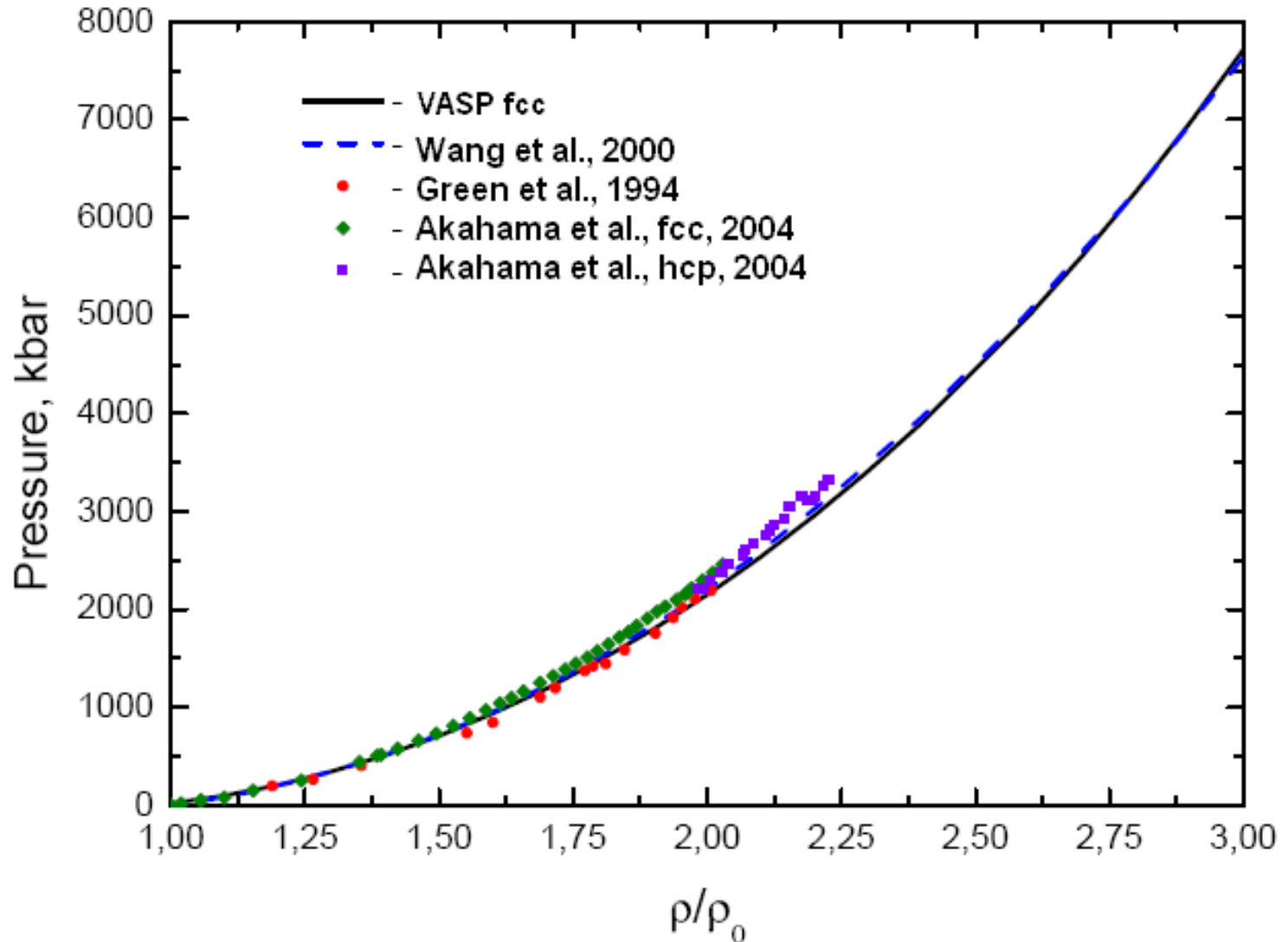


Количество атомов: 108  
Число шагов: 500  
Временной шаг: 2 fs  
1 k-точка в зоне Бриллюэна (Г точка)  
Ультрамягкий потенциал (Vanderbilt, 1990)  
Обобщенное градиентное приближение  
для обменно-корреляционного функционала



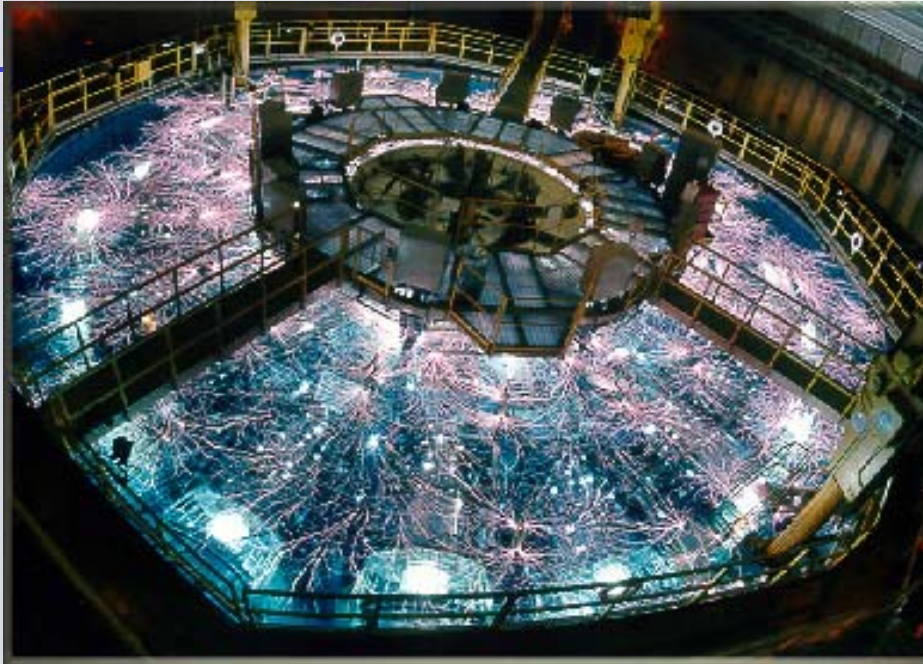


# КМД. Изотерма $T = 293$ К для Al

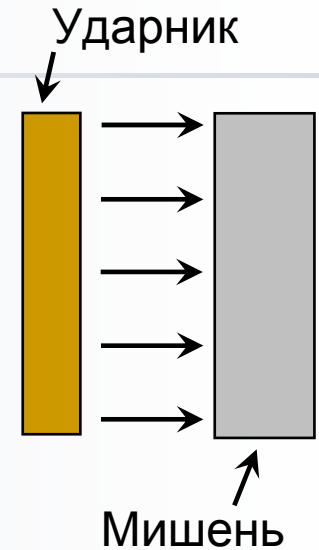




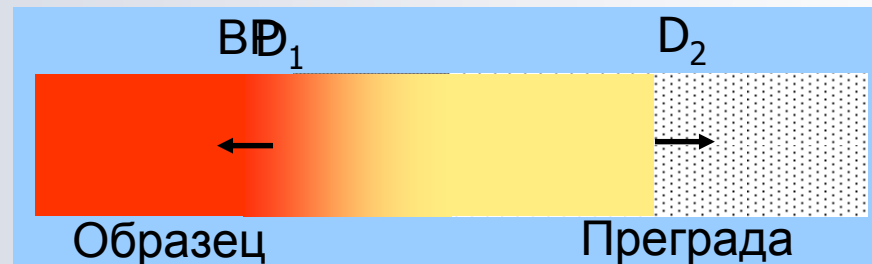
# Ударно-волновые эксперименты



Sandia's Z Machine



Изоэнтропа разгрузки



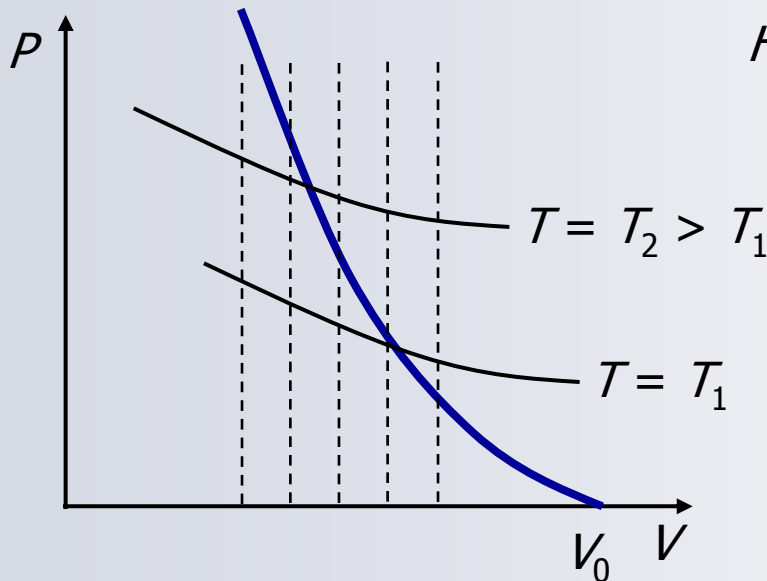


# Ударная адиабата Al

- Начальные условия для уравнения Гюгонио

$$P_0 = 1 \text{ атм}, 1 / V_0 = \rho_0 = 2.71 \text{ г/см}^3, E_0 = -3.607 \text{ эВ}$$

- Решается уравнение Гюгонио вдоль изотермы

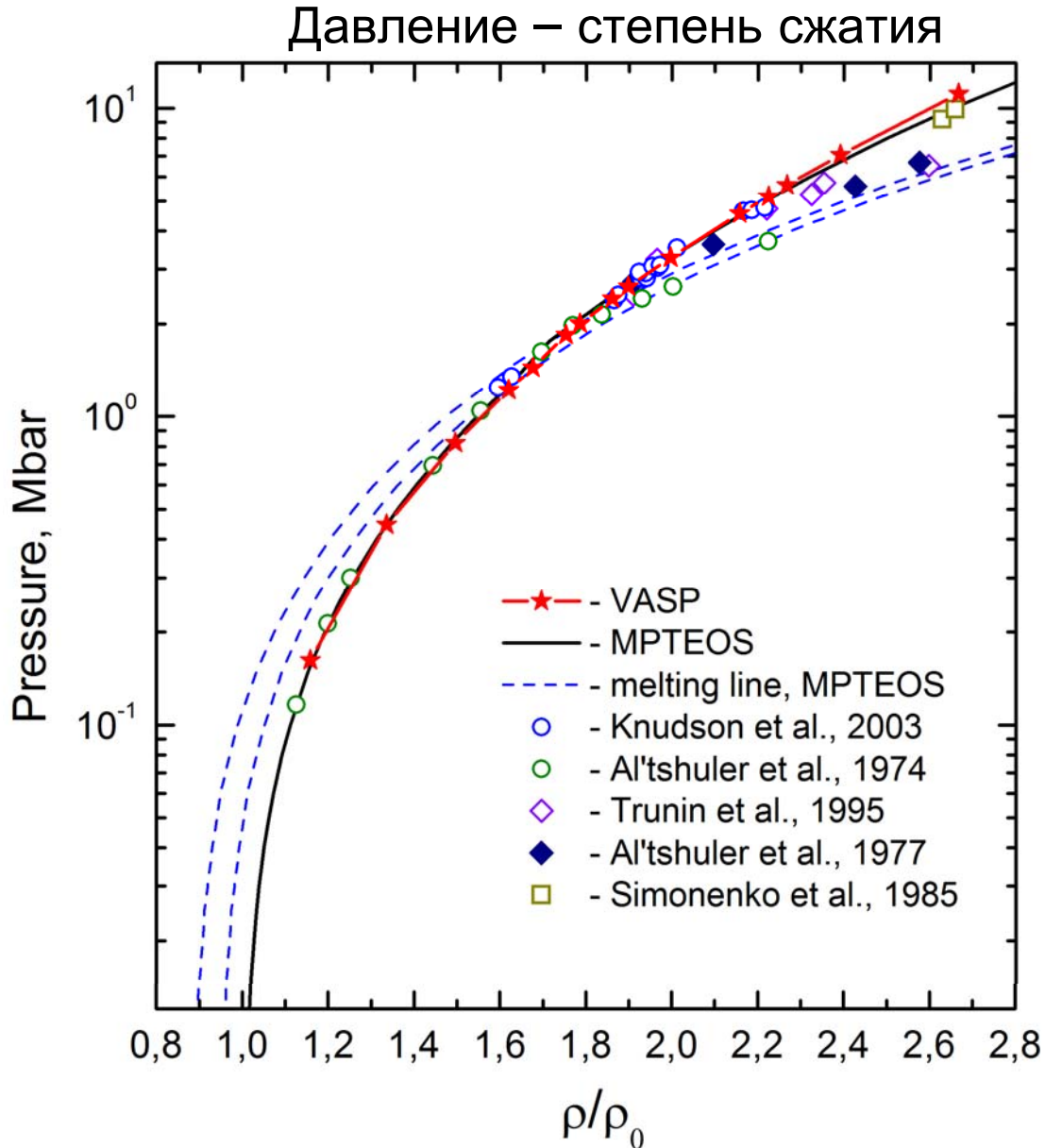


$$H(V) = E - E_0 + \frac{1}{2}(V - V_0)(P + P_0) = 0$$

$$293 \text{ K} < T < 75000 \text{ K}$$



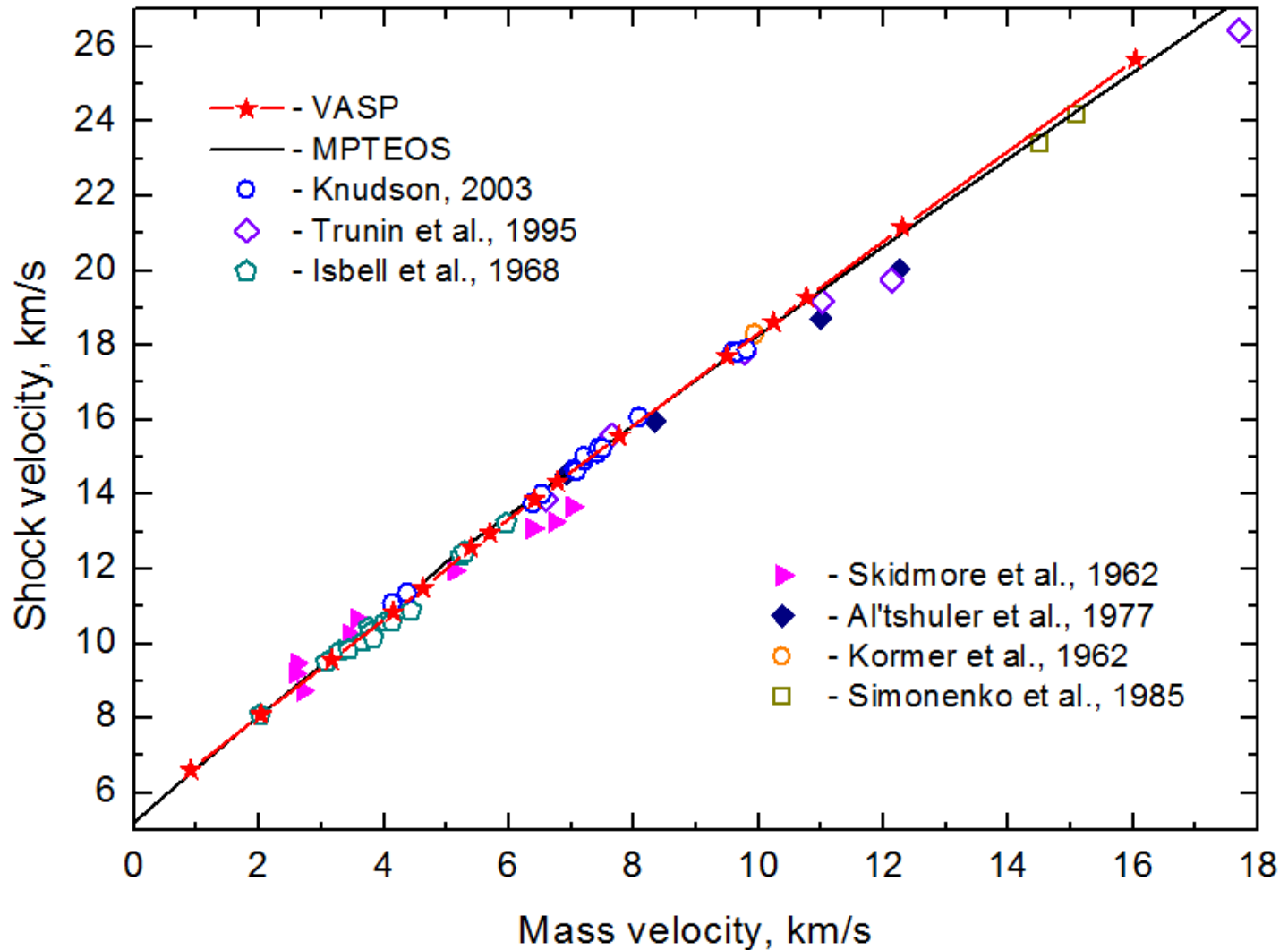
# Ударная адиабата Al





# Ударная адиабата Al

Скорость ударной волны – массовая скорость



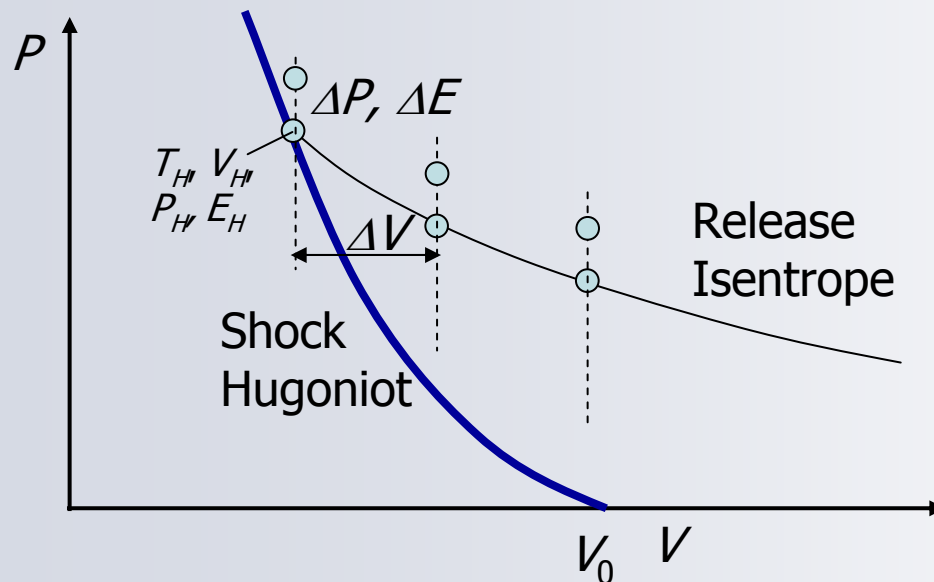


# Изоэнтропа разгрузки Al: расчет

- Метод Зельдовича (1957):

$$\frac{dT}{dV} = -\frac{T}{(\partial E/\partial P)_V}$$

- Метод локальной реконструкции



- Результат зависит от шага по объему и давлению
- Для улучшения точности расчет необходимо повторить



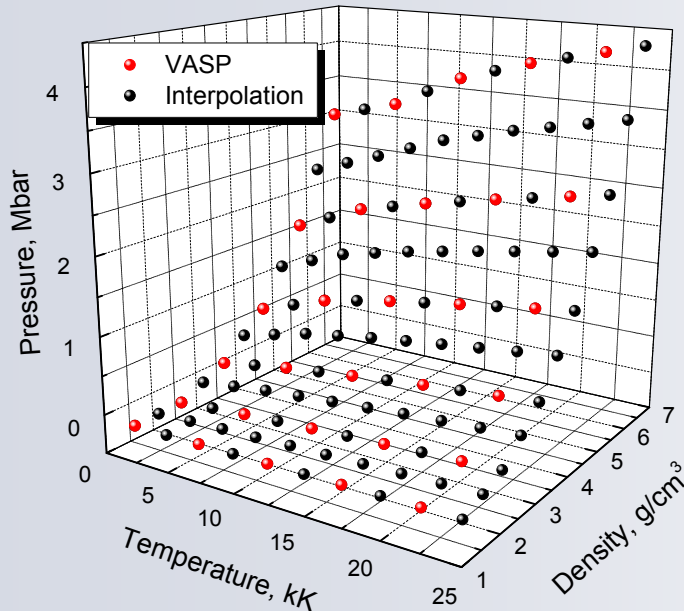
# Изоэнтропа разгрузки Al: расчет

- Метод глобальной реконструкции:  
интерполяция  $P(T, V)$  и  $E(T, V)$  сеткой изотерм и изохор

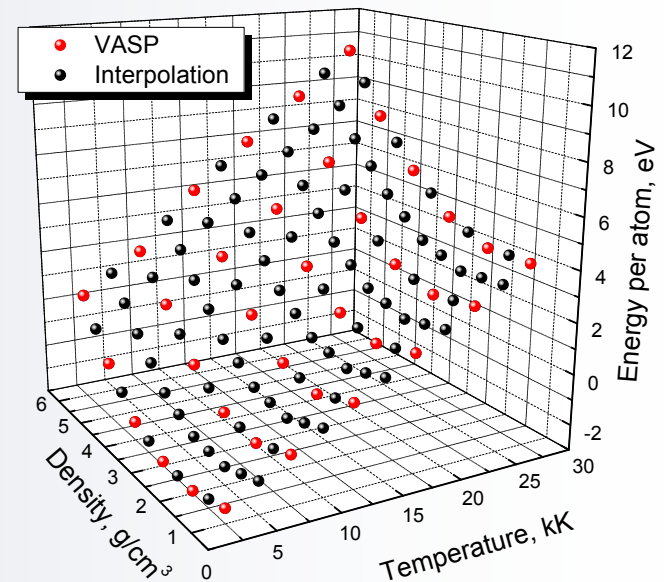
$$\frac{dT}{dV} = -\frac{T}{(\partial E / \partial P)_V} \quad \left(\frac{\partial E}{\partial P}\right)_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V / \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V$$

- Интегрирование с любым шагом по объему
- Изоэнтропа может быть уточнена улучшением решетки;
- Массовая скорость восстанавливается по инварианту Римана

Давление



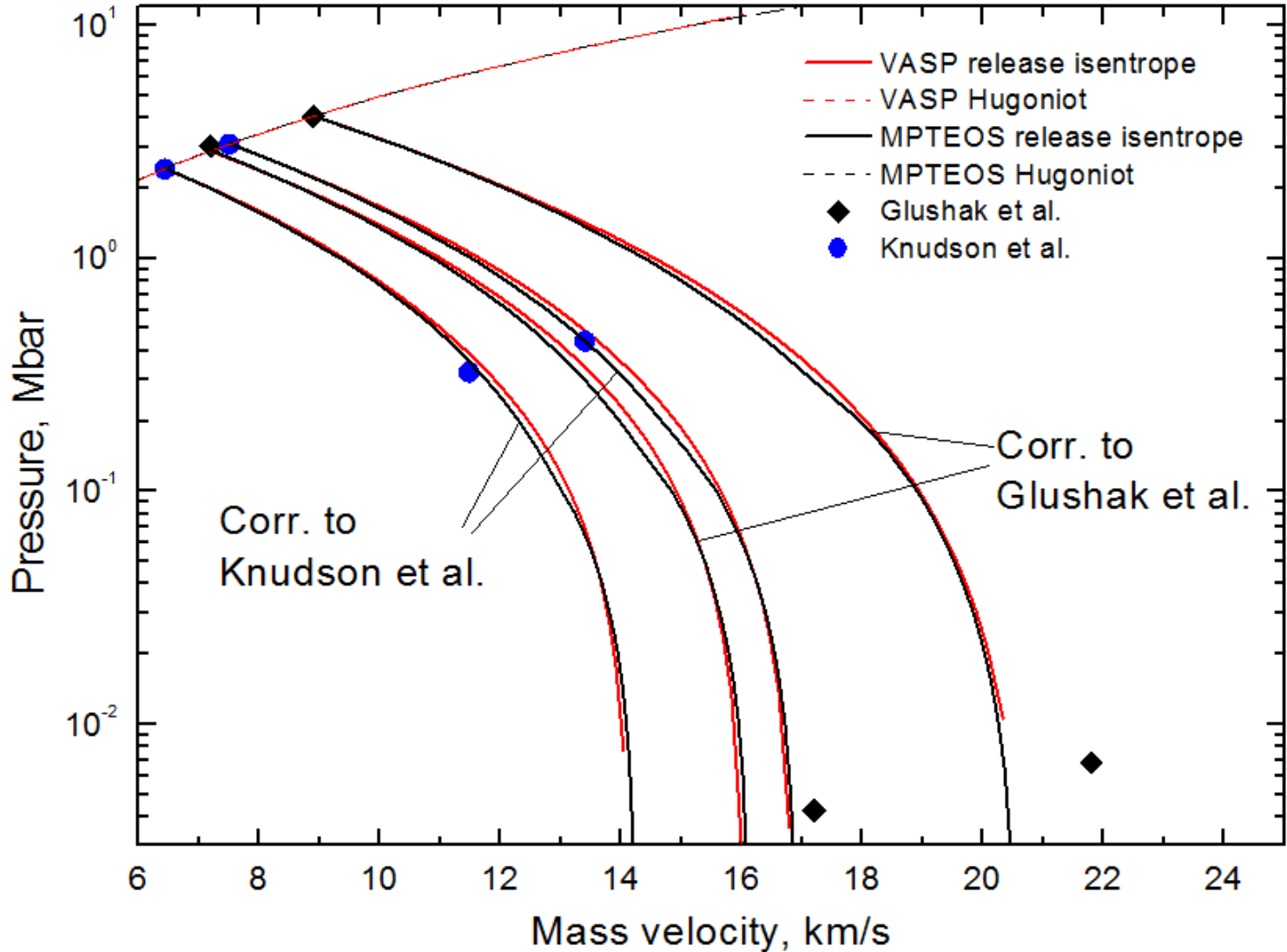
Энергия





# Изоэнтропы разгрузки Al

Давление – массовая скорость

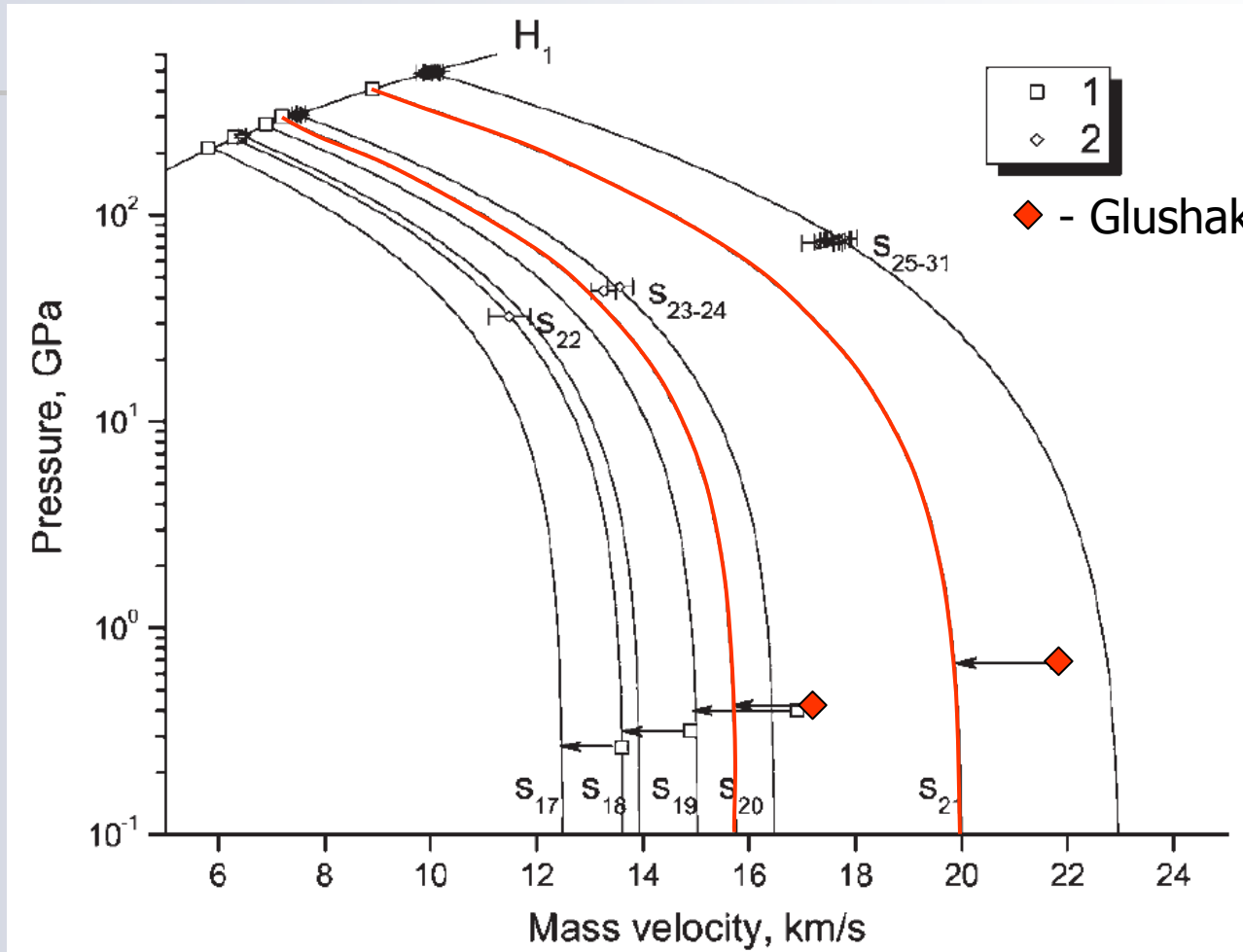






# Изоэнтропы разгрузки Al

Давление – массовая скорость

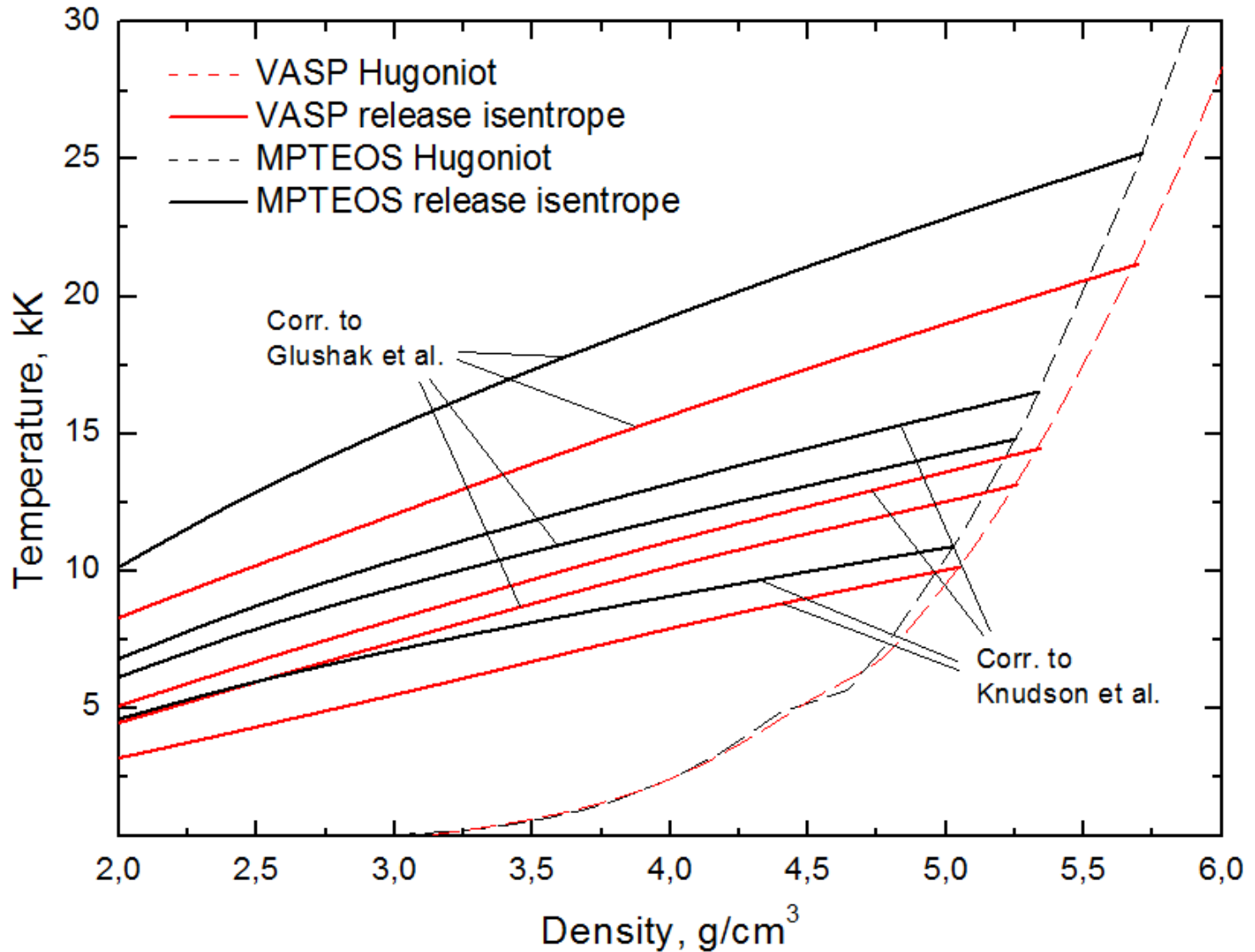


I.V. Lomonosov Multi-phase equation of state for aluminum // Laser and Particle Beams. 2007



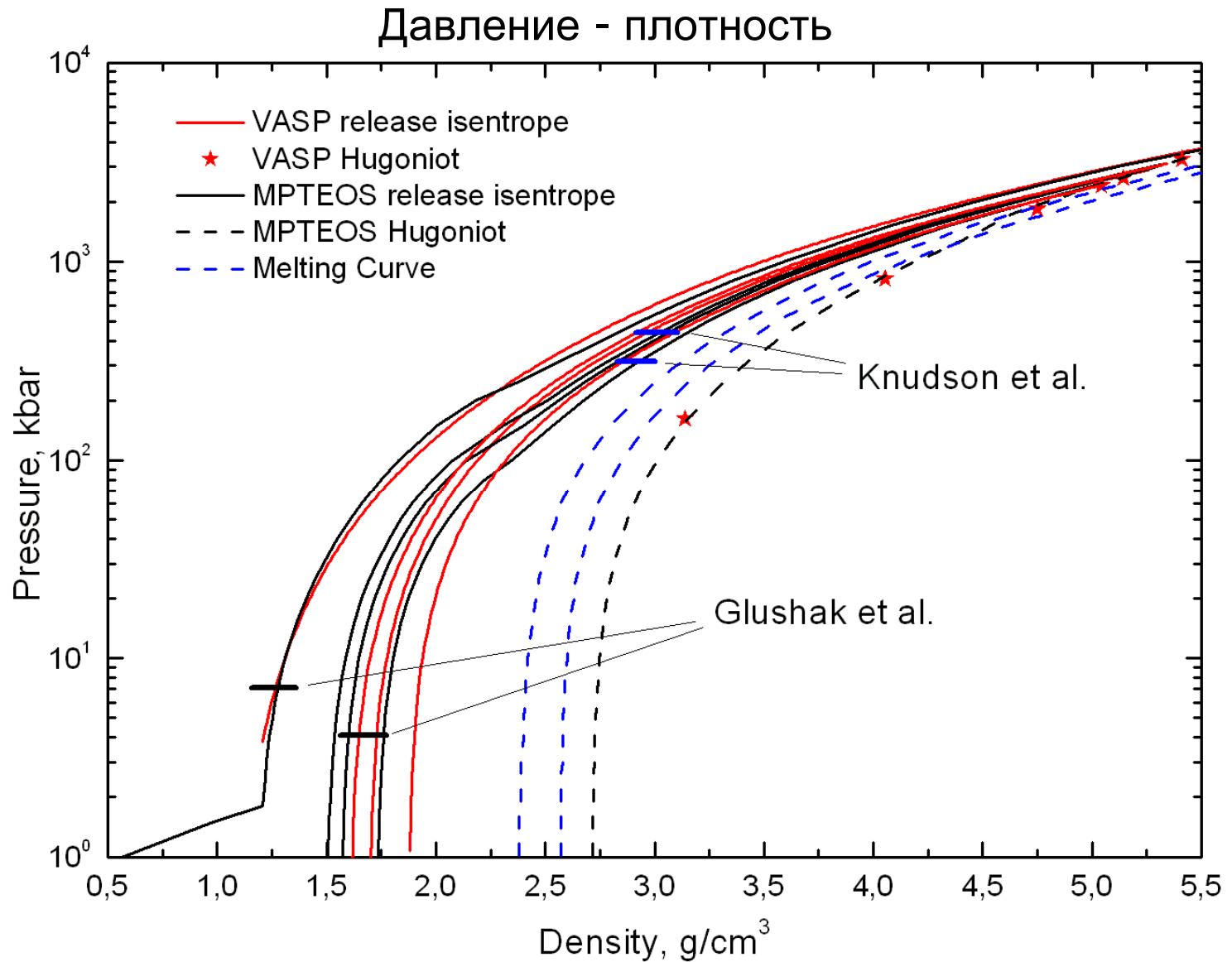
# Изоэнтропы разгрузки Al

Температура - плотность





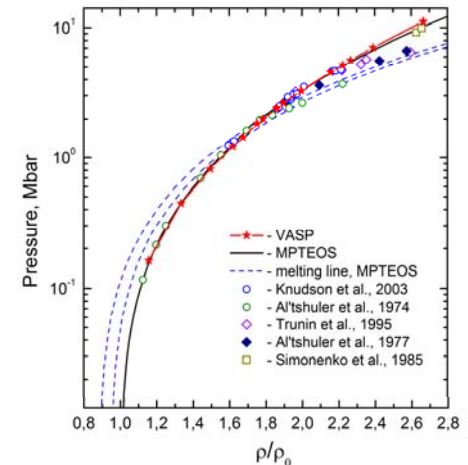
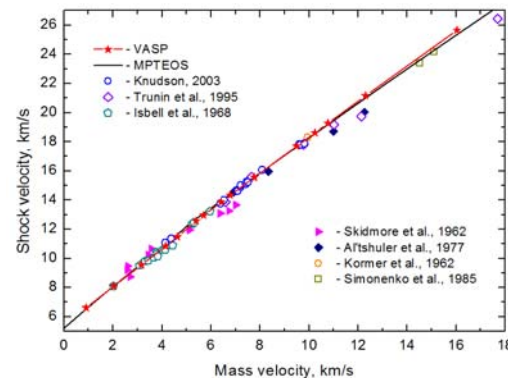
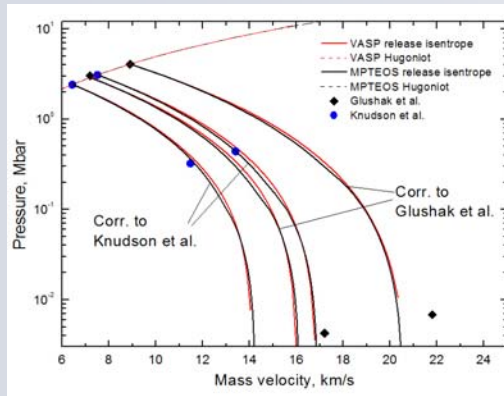
# Изоэнтропы разрузки Al





# Заключение

- Квантовая молекулярная динамика – мощное средство для расчета свойств веществ.
- Ударная адибата Al, построенная при помощи QMD, отлично совпадает с экспериментальными данными.
- Изоэнтропа разгрузки Al, рассчитанная QMD, хорошо согласуется с экспериментом.
- Температура в начале изоэнтропы разгрузки, рассчитанной широкодиапазонным УРС выше, чем дает VASP.
- Результаты расчетов с помощью квантовой молекулярной динамики могут **заменить дорогостоящий эксперимент.**





# Зависимость от параметров расчета

