

РАСЧЕТ ИЗОЭНТРОПЫ СЖАТИЯ ДЕЙТЕРИЯ МЕТОДОМ КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Ченцов А. В., Левашов П. Р.
ОИВТ РАН, Москва

В работе представлен расчет изоэнтропы сжатия дейтерия. Используется программа VASP [1], основанная на псевдопотенциальном методе функционала плотности с псевдопотенциалом PAW и обобщенно-градиентным приближением для обменно-корреляционного функционала. Используется метод квантовой молекулярной динамики, основанный на приближении Борна-Оппенгеймера. С помощью этого метода вычисляются давление и внутренняя энергия плотной дейтериевой плазмы. Расчеты выполнены в диапазоне температур 293–25000 К и плотностей 0.9–4.3 г/см³. Для восстановления изоэнтропы используется метод Зельдовича, результаты сравниваются с экспериментальными данными [2] и другими теориями. Положение вычисленной изоэнтропы слегка зависит от начальной точки, но согласуется с начальной частью экспериментальной изоэнтропы и точкой при самом высоком давлении (18 Мбар). Однако скачок плотности, зафиксированный в опытах [2], не обнаружен.

1. G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B. 1993, 47, 558; Ibid. 1994, 49, 14251.
2. V. E. Fortov et al., Phys. Rev. Lett., 2007, 99, 185001.