Моделирование термодинамических и транспортных свойств сильнонеидеальной плазмы методом квантовой молекулярной динамики

П.Р. Левашов, Д.В. Князев, Д.В. Минаков, А.В. Ченцов

Объединенный институт высоких температур РАН, Москва, Россия, pasha@ihed.ras.ru

В работе представлены результаты моделирования термодинамических, транспортных и оптических свойств сильнонеидеальной плазмы при плотностях порядка нормальной для данного вещества и температурах менее 10 эВ. Используется метод квантовой молекулярной динамики, реализованный в программном пакете VASP [1]. Для сравнения с доступными экспериментальными данными по термодинамическим свойствам привлекаются все типы имеющихся ударно-волновых данных: по ударному сжатию сплошных и пористых образцов, по адиабатическому расширению, по квазиизоэнтропическому сжатию и по измерению скорости звука за фронтом ударной волны. В моделировании участвуют металлы (алюминий, медь, серебро, золото) и дейтерий. Исследуются как термодинамические, так и транспортные свойства (комплексная диэлектрическая проницаемость, коэффициент теплопроводности), результаты сравниваются с существующими моделями. В большинстве случаев получается очень хорошее согласие с экспериментальными данными. Обсуждаются отличия от традиционных моделей, в частности, нарушение закона Видемана-Франца. Результаты расчетов используются для калибровки полуэмпирических моделей уравнения состояния и транспортных свойств. В последнем случае применяется выражение, содержащее сумму полюсов Лоренца и удовлетворяющее всем необходимым асимптотикам. Построенные модели могут быть использованы для прямого моделирования поглощения излучения в металлах и диэлектриках.

Литература

1. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. Phys. Rev. B. 1993. V. 47. P. 558-561.