

# РАСЧЁТ РАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ ПЛОТНОГО РАЗОГРЕТОГО ДЕЙТЕРИЯ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ

*Лавриненко Я.С.,<sup>\*1,2</sup> Морозов И.В.,<sup>1,2</sup> Валуев И.А.<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>*ОИВТ РАН, Москва, Россия, <sup>2</sup>МФТИ, Долгопрудный, Россия*

*\*lavrinenko@phystech.edu*

Метод компьютерного моделирования, основанный на объединении молекулярной динамики волновых пакетов и теории функционала плотности (WPMD-DFT), применяется для исследования плотного разогретого дейтерия и гелия. Этот метод был разработан недавно [1–3] как расширение молекулярной динамики волновых пакетов (WPMD), в котором уравнения движения решаются одновременно для классических ионов и полуклассических электронов, представленных в виде гауссовых волновых пакетов. По сравнению с классической молекулярной динамикой и оригинальным WPMD, метод WPMD-DFT обеспечивает более точное представление квантовых эффектов, таких как электронное вырождение. В WPMD-DFT используется приближение Хартри для многоэлектронной волновой функции, но обменно-корреляционные эффекты определяются функционалом, взятым из DFT и рассчитываемым путём интегрирования функции, зависящей от плотности электронов по пространственной сетке. Локальное распределение электронной плотности определяется положением и шириной волновых пакетов.

Изэнтропа сжатия и ударная адиабата для дейтерия рассчитанные методом WPMD-DFT сравниваются с доступными экспериментальными данными и другими подходами первопринципными методами компьютерного моделирования. Расчет изоэнтропы выполняется как последовательность этапов сжатия и релаксации. Исследуется сходимость результатов моделирования в зависимости от скорости сжатия. Кроме того, метод WPMD-DFT используется для расчета изоэнтропы по методу Зельдовича.

Как для изоэнтропического, так и для ударного сжатия дейтерия результаты WPMD-DFT сравниваются с экспериментальными данными и другими более точными моделями QMD. Результаты находятся в хорошем согласии, за исключением некоторого завышения давления.

---

1. Lavrinenko Ya.S., Levashov P.R., Minakov D.V., Morozov I.V., Valuev I.A. // Phys. Rev. E. 2021. V. 104. P. 045304.

2. Lavrinenko Ya.S., Morozov I.V., Valuev I.A. // J. Phys. Conf. Ser. 2021. V. 1787. P. 012043.

3. Lavrinenko Ya.S., Morozov I.V., Valuev I.A. // Contrib. Plasma Phys. 2019. V. 59. P. e201800179.