

# AB INITIO РАСЧЕТЫ РАЗОГРЕТОГО ПЛОТНОГО АРГОНА

*Сартан Р. А.*

*ОИВТ РАН, Москва, Россия*

*r.sartan@gmail.com*

Разогретый плотный аргон исследуется в рамках метода молекулярной динамики с использованием теории функционала плотности. Всего рассчитаны 8 изотерм аргона в области температур  $T = 4000 - 25000$  К и плотностей  $\rho = 1 - 20$  г/см<sup>3</sup>. В разогретом плотном аргоне давление растет плавно с ростом плотности вдоль изотерм, без скачков плотности.

Вдоль изотерм рассчитана электрическая проводимость. Получено качественное сходство с результатами аналитических моделей [1, 2]: на изотермах есть минимумы, которые сглаживаются с увеличением температуры, хотя положения минимумов отличаются на порядки по как проводимости, так и по плотности. При любых моделях изотермы сходятся с увеличением плотности, что можно интерпретировать как переход в металлоподобное состояние. Проводимость разогретого плотного аргона изменяется плавно как с ростом плотности, так и с ростом температуры. Последнее говорит об отсутствии плазменного фазового перехода, так как тот предполагает скачок проводимости.

Результаты МД количественно отличаются от экспериментальных данных [3]. Ударная адиабата [3] получена в диапазоне плотностей  $\rho = 2.5 - 3.5$  г/см<sup>3</sup> и температур  $T = 7300 - 24400$  К. Экспериментальная температура примерно в 2 раза больше, чем предсказывают МД и аналитические модели [1, 2].

Дополнительно произведена оценка концентрации свободных электронов и параметра неидеальности плазмы  $\Gamma$ . Параметр неидеальности варьируется от 5 до 50 в зависимости от температуры и плотности. Зависимость  $\Gamma$  от плотности аргона  $\rho$  вдоль изотерм близка к  $\Gamma \sim \rho^{0.33}$ .

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 19-08-01135.

- 
1. Фортов В.Е., Терновой В.Я., Жерноклетов М.В., Мочалов М.А., Михайлов А.Л., Филимонов А.С., Пялилинг А.А., Мищев В.Б., Грязнов В.К., Иоселевский И.Л. // ЖЭТФ. 2003. Т. 128., С. 288.
  2. Хомкин А. Л., Шумихин А. С. // ЖЭТФ. 2019. Т. 155., С. 869.
  3. Гатилов Л. А., Глуходедов В. Д., Григорьев Ф. В., Кормер С. Б., Кулешова Л. В., Мочалолов М. А. // ПМТФ. 1985. Т. 1., С. 99.