

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ КРИСТАЛЛА АЛЮМИНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

С. А. Губин¹, И. В. Маклашова², А. А. Селезнев³, С. А. Козлова⁴, Т. С. Демиденко⁵

Аннотация: Методом молекулярной динамики рассчитаны зависимость температуры плавления от давления в статических условиях и при ударно-волновом нагружении алюминия. Взаимодействие между атомами алюминия для твердой и жидкой фазы описывалось потенциалом Морзе. Получены ударная адиабата, изменение структуры алюминия и определена зависимость температуры кристалла алюминия от величины давления его ударного сжатия. Результаты молекулярно-динамического (МД) расчета с высокой точностью совпадают с результатами ударно-волновых экспериментов. Выделена область плавления кристалла алюминия при его ударно-волновом сжатии. Полученные результаты сравнивались с экспериментальными и теоретически вычисленными значениями для определения достоверных параметров плавления алюминия. Рассчитано, что для заданного давления 122 ГПа плавление в ударной волне (УВ) происходит при температуре более высокой, чем в статических условиях.

Ключевые слова: молекулярно-динамическое моделирование; ударная волна; потенциал межмолекулярного взаимодействия; линия плавления

Литература

1. Jeong Ji-Wook, Lee In-Ho, Chang K. J. Molecular-dynamics study of melting on the shock Hugoniot of Al // Phys. Rev. B, 1999. Vol. 59. P. 329–333.
2. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и быстропротекающих гидродинамических явлений. — М.: Физматлит, 2008. 652 с.
3. Seleznev A. A., Golubev V. K., Aleinikov A. Y., Butnev O. I., Barabanov R. A., Voronin B. L. Molecular dynamics simulation of shock wave compression of metals // Conference (International) “Shock Compression of Condensed Matter” (SCCM) Proceedings, 2001. USA, Atlanta. P. 374–377.
4. Seleznev A. A., Aleynikov A. Yu., Gantchuk N. S., Yermakov P. V., Labanovski J. K., Korkin A. A. SageMD: Molecular-dynamic software package to study properties of materials with different models for interatomic interactions // Comput. Mater. Sci., 2003. Vol. 28. P. 107–124.

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», sagubin@mephi.ru

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», ivmaklashova@mephi.ru

³Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», sel@soccc.ru

⁴Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; sandra969@yandex.ru

⁵Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»; tanosa@yandex.ru

5. Selezenev A. A., Aleynikov A. Yu., Ganchuk N. S., Ermakov P. V., Ganchuk S. N., Aidun J. B., Thompson A. P. Shock compression calculation of RDX and PETN molecular crystals using Hugoniot method // Conference (International) “Shock Compression of Condensed Matter” (SCCM) Proceedings. USA, Nashville, 2009.
6. Shock Wave DataBase. Available at: <http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>.
7. Shaner J. W., Brown J. M., McQueen R. G. Melting of metals above 100 GPa // Materials Research Society Symposia Proceedings, 1984. Vol. 22. P. 137–141.
8. Baker E. L., Capellos Ch. Jaguar procedures for detonation properties of aluminized explosives. New Jersey, U.S. ARMY TACOM-ARDEC Picatinny Arsenal, 2002. 07806.
9. Boehler R., Ross M. Melting curve of aluminum in a diamond cell to 0.8 Mbar: Implications for iron // Earth Planet. Sci. Lett., 1997. Vol. 153. P. 223.
10. Ботячкова А. И., Губин С. А., Соколова И. Л., Карпинский Г. Г. Молекулярно-динамическое моделирование плавления алюминия в макросостоянии при повышенном давлении // Ядерная физика и инжиниринг, 2013. Т. 4. № 5. С. 423–424.
11. Starikov S. V., Stegailov V. V. Atomistic simulation of the premelting of iron and aluminum: Implications for high-pressure melting-curve measurements // Phys. Rev. B, 2009. Vol. 80. P. 220104-1–220104-4.
12. Bouchet J., Bottin F., Jomard G., Zerah G. Melting curve of aluminum up to 300 GPa obtained through *ab initio* molecular dynamics simulations // Phys. Rev. B, 2009. Vol. 80. P. 094102-1–094102-5.
13. Moriarty J. A., Young D. A., Ross M. Theoretical study of the aluminum melting curve to very high pressure // Phys. Rev. B, 1984. Vol. 30. P. 578–588.

Поступила в редакцию 01.11.14