

Термодинамические функции и уравнение состояния вещества с заданным потенциалом межчастичного взаимодействия

Таровик Б.С.¹, Левашов П.Р.^{1,2}, Поварницын М.Е.²

¹Московский физико-технический институт (государственный университет),

²Объединенный институт высоких температур РАН

Существует два принципиально разных подхода для описания вещества. Первый из них — атомарный, в котором исследуется движение каждого отдельного атома с учетом его взаимодействия с другими атомами. После установления равновесия в системе посредством усреднения по времени можно определить ее термодинамические функции (энергию, давление, теплоемкость и т.п.)

Второй подход базируется на методах механики сплошной среды, при этом необходимо знание уравнения состояния вещества, которое обычно рассчитывается методами статистической физики.

Цель работы состоит в том, чтобы разработать метод восстановления уравнения состояния среды по известному потенциалу межчастичного взаимодействия. Для этого будет проведено молекулярно-динамическое моделирование с известным межчастичным потенциалом в различных ансамблях для расчета термодинамических величин, а затем посредством интерполяции будет построено уравнение состояния. Это позволит получать согласованные результаты при моделировании процессов в веществе методами механики сплошной среды и методом молекулярной динамики. Будут продемонстрированы предварительные расчеты восстановления уравнения состояния на примере потенциала Леннарда-Джонса, аналогично методике работы [1]. На данный момент, получен молекулярно-динамический алгоритм расчета изотермической и адиабатической скорости звука, а также теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении – величин, которые необходимы для восстановления уравнения состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы Президиума РАН «Теплофизика высоких плотностей энергии» I.13П.

Литература

1. *Baidakov V.G., Protsenko S.P.* Singular Point of a System of Lennard-Jones Particles at Negative Pressures. // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – V 95, N 015701. – P 1-4.