

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИДА АЛЮМИНИЯ ПО ДАННЫМ РАСЧЕТОВ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

А. А. Рыкунов

ФГУП «РФЯЦ – В НИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

На основе расчетов методами теории функционала плотности определены термодинамические свойства оксида алюминия (III) в области существования твердых фаз, расплаве и состоянии теплого плотного вещества. Рассмотренный диапазон термодинамических величин существенно расширен в сравнении с ранее применявшимися методами атомистического моделирования за счет использования обобщенного метода квантовой молекулярной динамики. Он охватывает область плотностей 4–17 г/см³, температур 0–1,5 МК и давлений 0–720 Мбар, что позволяет проводить прямое сравнение результатов первопринципного моделирования с расчетами по одноцентровым моделям. Показано хорошее согласие полученных численных значений с экспериментальными данными по статическому и ударно-волновому нагружению этого вещества (в виде корунда, сапфира и рубина), а также результатами других неэмпирических расчетов.
