

## Тема работы

# Критическая напряженность поля анизотропного спиновального распада для воды

## Состав коллектива

Денис Иванович Карпов, руководитель, к.ф.-м.н., с.н.с. ИГиЛ СО РАН, [karpov@hydro.nsc.ru](mailto:karpov@hydro.nsc.ru),  
Дмитрий Александрович Медведев, к.ф.-м.н., с.н.с. ИГиЛ СО РАН,  
Александр Леонидович Куперштох, д.ф.-м.н., зав. лабораторией ИГиЛ СО РАН.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 13-08-00763 и РНФ, грант № 16-19-10229

## Постановка задачи

Под действием экстремально сильного электрического поля в диэлектрической жидкости может при определенных условиях произойти фазовый переход (спиновальный распад) с образованием паро-газовых каналов, ориентированных вдоль напряженности поля (Куперштох, Медведев, 2005). Критическая напряженность поля  $E_c$ , при которой начинается спиновальный распад, зависит от второй производной диэлектрической проницаемости от плотности вещества. Поэтому, для расчета  $E_c$  необходимо знать зависимость  $\varepsilon(\rho)$  в достаточно широком диапазоне плотностей при постоянной температуре.

## Современное состояние проблемы

На сегодняшний день имеется большой объем данных о зависимости диэлектрической проницаемости воды от температуры. Зависимость  $\varepsilon(\rho)$  практически не исследовалась. Авторам работы известны данные Лукашова с коллегами 1981 и 1975 гг. для зависимости диэлектрической проницаемости воды от плотности в закритической области.

## Описание работы

Выполнены расчеты диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\rho)$  воды при температуре  $T = 670$  К, которая выше критической температуры воды, и двух значениях температуры ниже критической  $T = 350$  К и  $T = 300$  К.

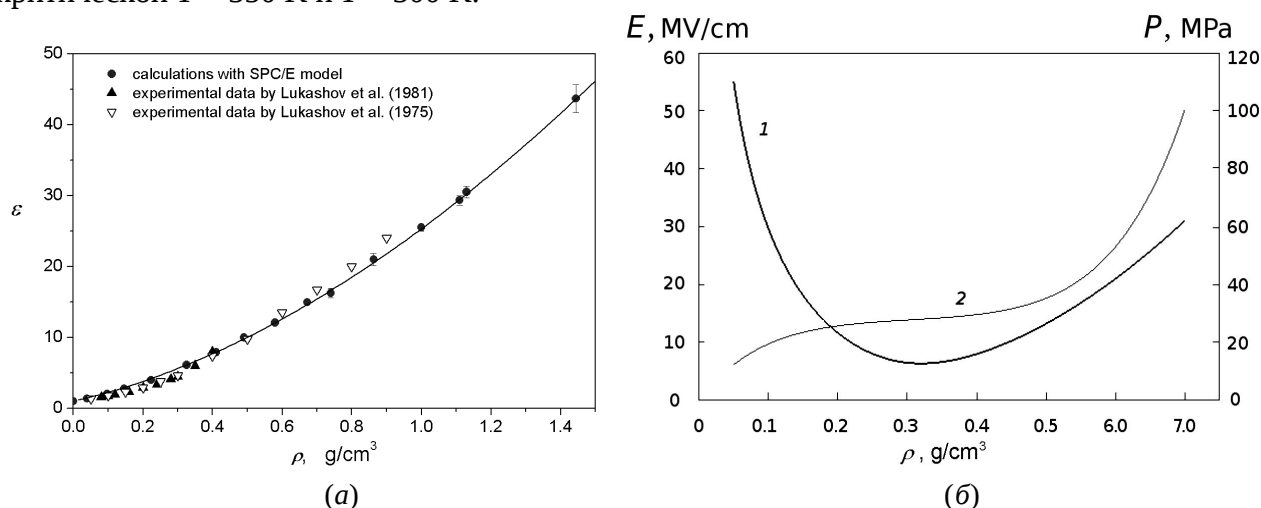


Рис. 1. Диэлектрическая проницаемость (а) и критическое поле  $E_c$  (б, кривая 1) при  $T = 650$  К.

Использовался метод расчета  $\varepsilon(\rho)$  через флуктуации вектора поляризации вещества. Для этого рассчитывалась эволюция ансамблей из  $\approx 5000$  молекул воды методом молекулярной динамики. Использовались пакеты LAMMPS и moltemplate. Расчеты выполнялись на кластере ИВЦ НГУ. Свойства молекул воды описывались моделью SPC/E.

Расчет  $\varepsilon(\rho)$  при  $T = 670$  К и расчет критического поля в соответствующем диапазоне плотностей показаны на рис. 1 а,б. При расчете  $E_c$  использовалось международное уравнение состояния воды (изотерма 2 на рис. 1, б).

Расчет зависимости  $\varepsilon(\rho)$  при температуре  $T = 350$  К и ее аппроксимация полиномом 2 степени показаны на рис. 2. Получено значение критической напряженности поля  $E_c = 24$  MV/cm при плотности  $\rho = 1$  g/cm<sup>3</sup>.

Вычисленные значения  $E_c$  для воды сравнимы со значениями напряженности электрического поля 10 – 30 MV/cm, при которых, согласно экспериментальным оценкам, формируются каналы стримеров при пробое жидких диэлектриков. Таким образом, впервые получено подтверждение гипотезы о том, что анизотропный спиноподобный распад может быть механизмом, ответственным за образование стримеров в воде и, соответственно, за инициирование электрического пробоя в жидком диэлектрике.

## Полученные результаты

Впервые выполнены расчеты напряженности электрического поля  $E$ , при которой начинается анизотропный спиноподобный распад в воде при температуре  $T = 670$  К в диапазоне плотностей  $\rho = 0.03 - 1.44$  g/cm<sup>3</sup> и при  $T = 350$  К вблизи бинодали. При этом использовались зависимости диэлектрической проницаемости воды от плотности, полученные с помощью метода флуктуаций при молекулярно-динамическом моделировании ансамблей молекул воды. При  $T = 350$  К и  $\rho = 1$  g/cm<sup>3</sup> вычисленное значение  $E = 24$  MV/cm согласуется с данными экспериментов по инициированию стримеров в воде. Это подтверждает высказанную ранее гипотезу о том, что анизотропный спиноподобный распад может быть механизмом, ответственным за образование стримеров в воде и, соответственно, за инициирование электрического пробоя в жидком диэлектрике.

## Эффект от использования кластера в достижении целей работы

Все расчеты выполнены на кластере НГУ. Один расчет выполнялся на кластерах с узлами на CPU. В одном расчете использовалось от 12 до 24 узлов. Соответственно, время выполнения варьировалось от 72 до 36 часов. Было задействовано 2-4 ГБ оперативной памяти и от 5 до 12 ГБ памяти на диске в каждом расчете. Использование кластера ускорило вычисления примерно на порядок.

## Публикации

1. Куперштох А.Л., Карпов Д.И., Медведев Д.А. Моделирование анизотропного распада жидкого диэлектрика в сильных электрических полях с реальной зависимостью диэлектрической проницаемости воды от плотности // «Современные проблемы электрофизики и электрогидродинамики». Сборник докладов XI Международной научной конференции 29 июня – 3 июля 2015 года. Санкт-Петербург. – СПб.: ИД «Петроградский», 2015, с. 273-276.
2. Karpov D. I. and Medvedev D. A. Density dependence of dielectric permittivity of water and estimation of the electric field for the breakdown inception // Journal of Physics: Conference Series. 2016. Vol. 754. P. 102004(6).