УДК 533.93

Моделирование термодинамических свойств плазмы на основе широкодиапазонной квазиклассической модели среднего атома

A.C. Полюхин1,2, С.А. Дьячков2,3, П.Р. Левашов1,2

1Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)

2Объединённый институт высоких температур РАН  
3Всероссийский научно-исследовательскиӗ институт автоматики им. Н. Л. Духова

Для того, чтобы описать основные эффекты, возникающие в конденсированных средах в широком диапазоне температур и плотностей, необходимо в систему уравнений газовой динамики включать высокоточное уравнение состояния. Более простые подходы, основанные, например, на использовании модели Томаса-Ферми [1], не учитывают ряд физических эффектов, в том числе связанных с оболочечной структурой атомов. С другой стороны, более сложные подходы, основанные на использовании метода функционала плотности, требуют существенных вычислительных мощностей, что осложняет расчеты таблиц термодинамических функций в заданном диапазоне температур и плотностей. Таким образом, возникает потребность в создании относительно простого подхода к описанию термодинамических свойств системы, который, в свою очередь, сможет предоставить необходимую точность при умеренном использовании вычислительных ресурсов.

Основным результатом данной работы служит квазиклассическая модель среднего атома с самосогласованным потенциалом [2], с помощью которой были рассчитаны термодинамические свойства плазмы металлов в широком диапазоне температур и плотностей. В отличие от других развитых моделей среднего атома [3], представленная в работе модель изначально обладает термодинамической согласованностью, как это продемонстрировано на рис. 1 равенством соответствующих производных от термодинамических величин:

 (1)

где  – температура, – плотность,  – внутренняя энергия,  – энтропия.

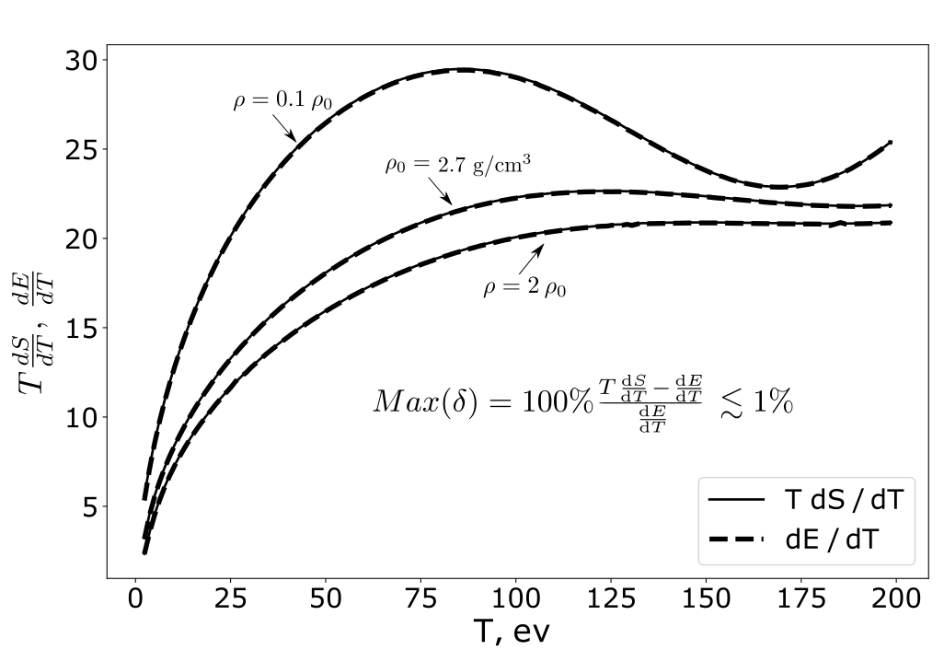


Рис. 1. Условие термодинамической согласованности для алюминия.

В данной работе продемонстрированы расчеты основных термодинамических параметров вещества в области температур и плотностей, в которой достигается сходимость и термодинамическая согласованность. Предложены идеи по улучшению сходимости и уточнению модели для дальнейших расчетов в более широком диапазоне параметров.

Литература

1. *Feynman R*. *P*., *Metropolis N*., *Teller E*. Equations of State of Elements Based on the Generalized Fermi-Thomas Theory // Phys. Rev. 1949. Vol. 75. P. 1561–1573.
2. *Nikiforov A. F., Novikov V. G., Uvarov V. B.* Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter. Methods for Computation Opacity and Equation of State (Birkhauser, Switzerland, 2005), P. 20-30.
3. *Liberman D. A.* INFERNO: a better model of atoms in dense plasmas // J. Quant.Spectrosc. Radiat. Trans. 1982. Vol. 27. Pp. 335 – 339.