

**Построение уравнения состояния смеси химических элементов
на основе квантово-статистических моделей**

М.А. Кадатский^{1,2}, К.В. Хищенко^{1,2}

¹Объединённый институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Для построения уравнений состояния вещества широко используются различные ячеечные квантово-статистические модели, использующие приближение самосогласованного атомного потенциала. Применение данных приближений тем более оправдано, чем выше температура и плотность вещества [1].

Простейшая из этих моделей – обобщённая модель Томаса–Ферми (ТФ) [2], в основе которой лежит использование квазиклассического приближения для электронов и статистики Ферми–Дирака. Учёт обменных и квантовых эффектов в рамках приближения ТФ приводит к модели Томаса–Ферми с поправками (ТФП) [3]. Разделение электронов на относящиеся к непрерывному и дискретному спектру и учёт обменной энергии в квазиклассическом приближении даёт уравнения модели Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) [4].

Кроме полученных по этим моделям термодинамических функций для электронов, также необходимо учесть компоненту, отвечающую за тепловое движение ионов. Базовой моделью учёта теплового движения ионов является модель идеального газа (ИГ). Добавляя к энергии ИГ поправку на ионно-ионное взаимодействие, осуществлён переход к модели однокомпонентной плазмы (ОКП). В модели заряженных твёрдых сфер (ЗТС) учитывается дополнительное слагаемое к ионному давлению, отвечающее за конечный размер ионов [4].

Важной и отдельной задачей при этом является расчет свойств веществ, представляющих собой смесь различных химических элементов (соединения, сплавы и другие смеси). Это имеет важное практическое значение, поскольку сплавы и соединения широко применяются в качестве материалов различного назначения, в том числе при интенсивных силовых и тепловых нагрузках. Знание уравнения состояния необходимо для проведения численного моделирования процессов, протекающих в этих условиях [5].

В работе представлены результаты расчётов ударных адиабат диоксида кремния в модификации кварца по моделям ТФ, ТФП и ХФС. Влияние теплового движения и взаимодействия ионов было учтено в рамках трёх моделей: ИГ, ОКП и ЗТС. Представлено сравнение с имеющимися экспериментальными данными (рис. 1).

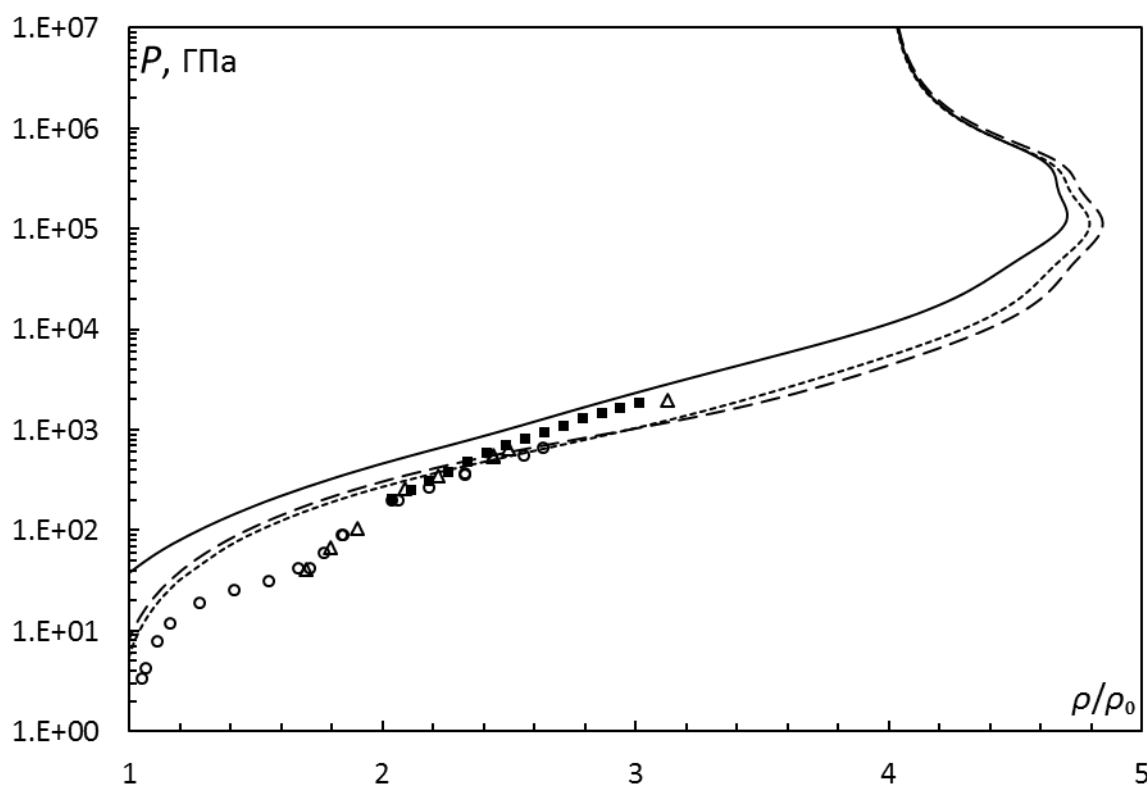


Рис. 1. Ударная адиабата кварца (начальная плотность образцов 2.65 г/см³). Электронный вклад в термодинамику рассчитан по модели ХФС. Приведены результаты при различных ионных вкладах в термодинамические функции: пунктирная линия – ИГ, штриховая линия – ОКП, сплошная линия – ЗТС. Экспериментальные данные: ○ – [6]; Δ – [7]; ■ – [8].

Литература

1. Бушман А.В., Фортон В.Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. – 1983. – Т. 140, № 2. – С. 177–232.
2. Feynman R.P., Metropolis N., Teller E. Equations of state of elements based on the generalized Fermi–Thomas theory // Phys. Rev. – 1949. – V. 75, N 10. – P. 1561–1573.
3. Киржниц Д.А. Квантовые поправки к уравнению Томаса–Ферми // ЖЭТФ. – 1957. – Т. 32, № 1. – С. 115–123.
4. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. – 400 с.
5. Орлов Н.Ю. Метод расчета самосогласованных потенциалов для смеси химических элементов // ЖВММФ. – 1986. – Т. 26, № 8. – С. 1215–1233.
6. Трунин Р. Ф., Симаков Г. В., Подурец М. А. Сжатие пористого кварца сильными ударными волнами // Изв. АН СССР. Физика Земли. – 1971. – № 2. С. 33–39.
7. Трунин Р. Ф. Ударная сжимаемость конденсированных веществ в мощных ударных волнах подземных ядерных взрывов // УФН. – 1994. – Т. 164, № 11. – С. 1215–1237.

8. *Qi T. [et al.]* Optical and transport properties of dense liquid silica // *Physics of Plasmas.* – 2015. – V. 22, N 2. – P. 062706.