

**Область применимости модели Томаса-Ферми с квантовыми,
обменными и оболочечными поправками.**

С. А. Дьячков^{1,2}, П. Р. Левашов^{1,2}

¹Объединенный институт высоких температур РАН

²Московский физико-технический институт (государственный университет)

Широкодиапазонные уравнения состояния необходимы во многих приложениях современной физики [1, 2]. Характерные для физики экстремальных состояний вещества явления (такие как сильные ударные волны, облучение металлов фемтосекундным лазерным импульсом, сжатие мишеней в инерционном термоядерном синтезе) часто сопровождаются переходом вещества в жидкость или неидеальную плазму. В этих состояниях вещество представляет собой квантовую систему с сильной корреляцией, для которой довольно сложно построить адекватное теоретическое описание.

Первопринципные подходы, такие как теория функционала плотности и основанный на ней метод квантовой молекулярной динамики могут применяться только в ограниченной области фазовой диаграммы. Эти ограничения обусловлены применимостью обменно-корреляционных функционалов и вычислительной мощностью современных компьютеров, что не позволяет проводить расчёты при температурах порядка десятков эВ, а также при низких плотностях [3]. Простой подход, такой как модель Томаса-Ферми, даёт вполне реалистичное описание электронной подсистемы при высоких температурах [4]. Область применимости модели по отношению к квантовым и обменным поправкам [5] исследовалась ранее [6]. Однако в разреженной плазме и при больших сжатиях существенный вклад в термодинамические величины дают оболочечные эффекты [7]. Вопрос об области применимости модели по отношению к оболочечным поправкам по-прежнему остается открытым.

Новый метод расчёта позволяет получать оболочечные поправки к термодинамическим функциям электронов в широком диапазоне параметров [8,9]. В данной работе выявлена область применимости модели Томаса-Ферми как по отношению к квантовым, обменным и оболочечным поправкам, так и в ходе сравнения с более точными первопринципными подходами.

Работа поддержана грантом РФФИ № 14-08-31450, а также проектом Министерства образования и науки Российской Федерации № 3.522.2014/К.

Литература

1. *Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер*, Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. *S. Eliezer, A. Ghatak, and H. Hora*, Fundamentals of Equations of State. – World Scientific, 2002.
3. *M. Desjarlais, F. Graziani, R. Redmer, and S. Trickey*, Frontiers and Challenges in Warm Dense Matter: Lecture Notes in Computational Science and Engineering, – Springer, 2014.
4. *А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы – М: Физматлит, 2000. – 400 с.
5. *Куржниц, Д. А.*, Квантовые поправки к уравнению Томаса-Ферми. // ЖЭТФ. – 1957. – Т. 32. – N. 1 – С. 115-123.
6. *Sergey Dyachkov and Pavel Levashov*, Region of validity of the finite-temperature Thomas-Fermi model with respect to quantum and exchange corrections. // Physics of Plasmas, – 2014. – V. 21. – P. 052702.
7. *Г. В. Шпатаковская*, Квазиклассическая модель строения вещества. // Успехи физических наук, – 2012. – Т. 182. – No. 5. – С. 457-494.
8. *Dyachkov S.A., Levashov P.R.*, Methods for calculating the shell corrections in the Thomas-Fermi model // Physics of Extreme States of Matter – 2014. Chernogolovka: IPCP RAS. – 2014. – P. 8-11.
9. <https://github.com/dya4kov/FTTFQES>