

Квазизонная модель вещества

А.С. Грушин, В.Г. Новиков

Проблема учета эффектов плотности, т.е. межионного и ион-электронного взаимодействия в плотной плазме стоит давно и пока что далека от решения в плане практических расчетов. В частности, на всех конференциях по вычислению непрозрачности обсуждается проблема влияния большой плотности и эффектов давления на энергетический спектр электронов и коэффициенты непрозрачности. Аналогичная проблема существует и при расчетах термодинамических свойств плазмы. Однако до сих пор на практике для снижения границы ионизации применяются эмпирические формулы 50-х годов прошлого века типа Инглиса-Теллера или Прятта, а также методы обрезания дискретных уровней по радиусу орбиты (дискретный уровень существует до тех пор, пока радиус соответствующей орбиты меньше межионного расстояния). Такие подходы позволяют качественно описать эффекты плотности, однако являются по сути эмпирическими, применимы лишь в небольшой области изменения плотностей и не дают представления о физике явления.

Одним из наиболее простых, но в то же время достаточно последовательным и эффективным методом учета влияния давления на свойства плотной высокотемпературной плазмы был и остается метод Томаса-Ферми (ТФ), обобщенный на учет ионов и электронов. Включение обменных членов и корреляционных поправок в модель ТФ позволяет значительно расширить ее область применимости.

В обобщенной модели ТФ энергетический спектр электронов считается непрерывным, что является слишком грубым приближением, так как не позволяет описать особенности оболочечной структуры атомов рассматриваемого вещества. Последовательный учет оболочечной структуры проводится на основе моделей самосогласованного поля, в частности, модели Хартри-Фока-Слэтера (ХФС) [1]. В модели ХФС используется приближение среднего атома, в котором совокупность ионов в различных состояниях описывается одним представителем – ионом со средними числами заполнения. Энергетический спектр такого иона состоит из трех групп состояний -- дискретных, непрерывных и промежуточных. Для описания промежуточных (слабосвязанных) состояний электронов используется модель усредненных сферических ячеек с граничными условиями квазипериодичности и вводится понятие квазизон. Такой подход позволяет проводить расчеты по единой модели при произвольной плотности вещества и в результате получать не только детальную информацию об энергетическом спектре электронов в веществе, но и гладкие термодинамические функции в широком диапазоне температур и плотностей (на практике расчеты проводились в диапазоне от 10^{-4} г/см³ до 10^4 г/см³ по плотности и от 1 эВ до 10 кэВ по температуре).

Учет квазизон очень важен при описании процесса выдавливания дискретных уровней в непрерывный спектр, так как позволяет получить физически более оправданную картину погружения уровней в непрерывный спектр при увеличении плотности вещества по сравнению с другими подходами. Расчеты проводятся с использованием численных волновых функций для всех электронных состояний. В качестве примера приведены результаты расчетов уравнений состояния и ударных адиабат для He, Be, Al, Fe, Sn, Pb.

Список литературы

[1] *Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B., Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter. Methods for Computation Opacity and Equation of State. Birkhäuser, 2005.*