



ИНТСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ им. М.В.Келдыша РАН

Квазизонная модель вещества

Грушин А.С., Новиков В.Г.

Научно-координационная Сессия «Исследования неидеальной плазмы»
4-5 декабря 2007 г.



Введение

- Проблема учёта плотностных эффектов при расчётах УРС, коэффициентов непрозрачности и других характеристик плотной высокотемпературной плазмы.
- Используемые подходы малоэффективны и применимы в узких областях.
- Для проведения практических расчётов желательно иметь общую модель, позволяющую проводить расчёты по одним формулам (в одном приближении) в широком диапазоне изменения температуры и плотности.
- Модели ТФ и ТФП не описывают энергетический спектр электронов, необходимый для расчетов непрозрачности.



Модель

- Совокупность электронов и ионов различной кратности описывается ионом со средними числами заполнения в электронейтральной сферической ячейке.
- Энергетический спектр среднего иона состоит из трёх групп состояний: дискретных, непрерывных и промежуточных (**квазизон**).
- Для построения квазизон используются квазипериодические граничные условия в средне-сферическом приближении.
- Проводится термодинамически согласованный учёт дискретного, промежуточного и непрерывного спектров.
- Обменные и корреляционные эффекты учитываются в локальном приближении.
- Модель ХФС + квазизоны = Квазизонная Модель Вещества (QZM).



Основные формулы модели QZM

Плотность электронов:

$$\rho(r) = \int d\vec{k} \int d\Omega \sum N(\varepsilon_\nu) |\Psi_\nu(\vec{r})|^2$$

$$N(\varepsilon_\nu) = \frac{2}{1 + \exp \frac{\varepsilon_\nu - \mu}{\theta}}, \quad \begin{cases} \varepsilon_\nu = \varepsilon_{nlm}(k) & \text{- квазизоны} \\ \varepsilon_\nu = \varepsilon_{nl} & \text{- дискретные уровни} \end{cases}$$

Внутри-атомный потенциал:

$$V(r) = V_c(r) + V_{\text{ex}}(r)$$

$$V_c(r) = \frac{Z}{r} - 4\pi \left[\frac{1}{r} \int_0^r r'^2 \rho(r') dr' + \int_r^{r_0} r' \rho(r') dr' \right]$$

$$V_{\text{ex}}(r) = \frac{\pi\rho(r)}{\theta} \left[1 + 5.7 \frac{\rho(r)}{\theta^{3/2}} + \frac{\pi^4}{3} \frac{\rho^2(r)}{\theta^3} \right]^{-1/3}$$



Основные формулы модели QZM

Квазизонная волновая функция

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = \sum_{\ell' \geq m} i^{\ell'} A_{nlm, \ell'}(k) \frac{1}{r} R_{\varepsilon \ell'}(r) Y_{\ell' m}(\vartheta, \varphi)$$

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta - V(r) \right) \Psi_{nlm}(\vec{r}) = \varepsilon_{nlm}(k) \Psi_{nlm}(\vec{r})$$

Квазипериодические граничные условия

$$\left| \Psi_{nlm}(\vec{r}) \right|^2 = \left| \Psi_{nlm}(-\vec{r}) \right|^2, \quad (|\vec{r}| = r_0)$$

$$\begin{cases} e^{-i\vec{k}\vec{r}} \Psi_{nlm}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \Psi_{nlm}(-\vec{r}) \\ e^{-i\vec{k}\vec{r}} \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{nlm}(\vec{r}) = -e^{i\vec{k}\vec{r}} \frac{\partial}{\partial r} \Psi_{nlm}(-\vec{r}) \end{cases}$$

$$0 \leq k \leq k_0 = \left(\frac{9\pi}{2} \right)^{1/3} \approx 2.418$$

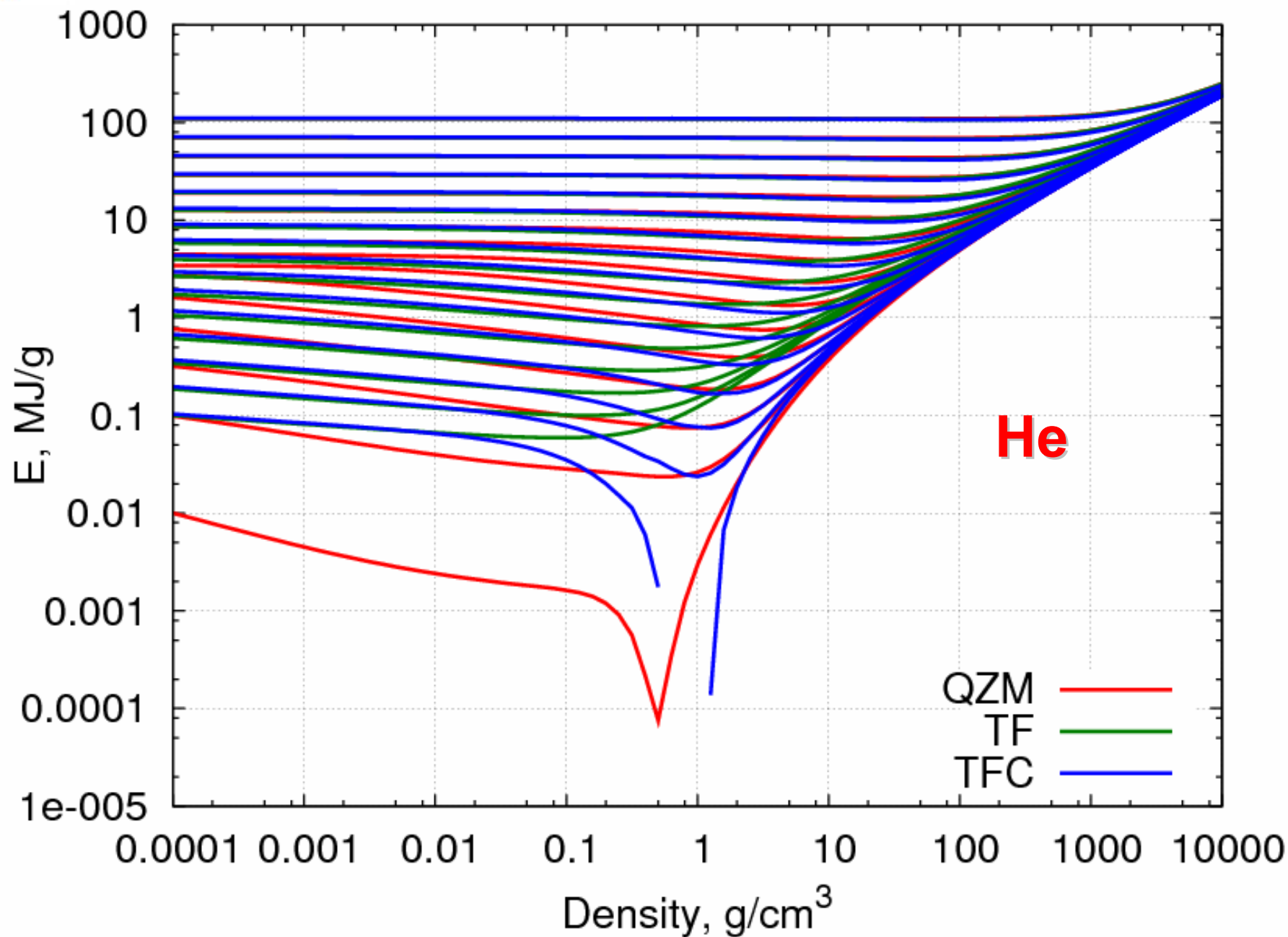


Результаты расчётов

- Модель реализована в программном коде, в том числе параллельном.
- В качестве примера приведены данные для **He**, **Al**, **Fe**, **Sn**, **Pb**. Расчёты проводились в широком диапазоне по плотности (от 10^{-4} до 10^4 г/см³) и температуре (от 1 эВ до ~10 кэВ).
- Проведено сравнение с экспериментальными данными.
- В УРС по модели QZM ионная часть вычислялась по модели заряженных твердых сфер, для моделей TF и TFC – в приближении идеального газа.
- Экспериментальные данные по адиабатам взяты из банка данных <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>

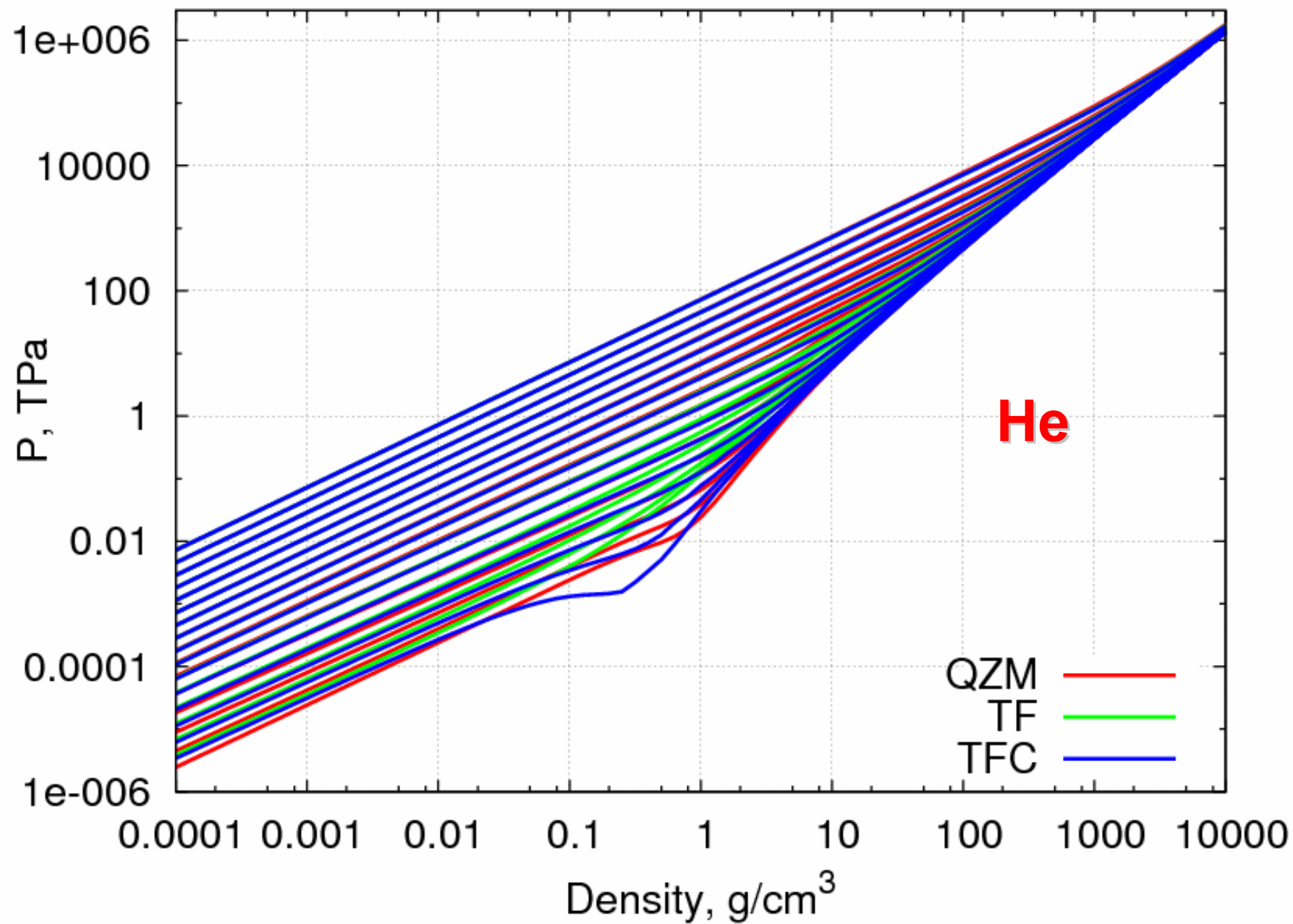


Удельная внутренняя энергия



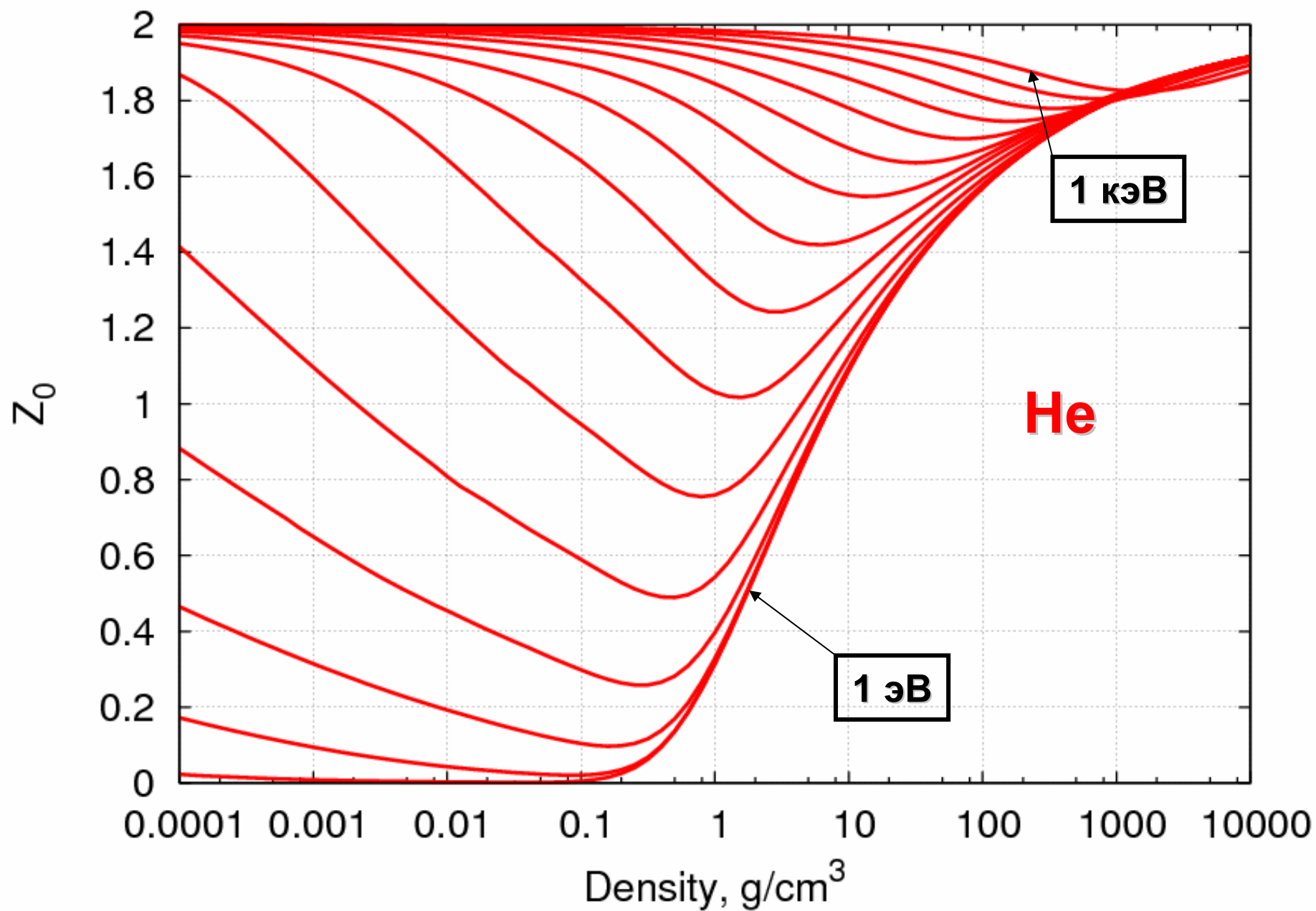


Давление



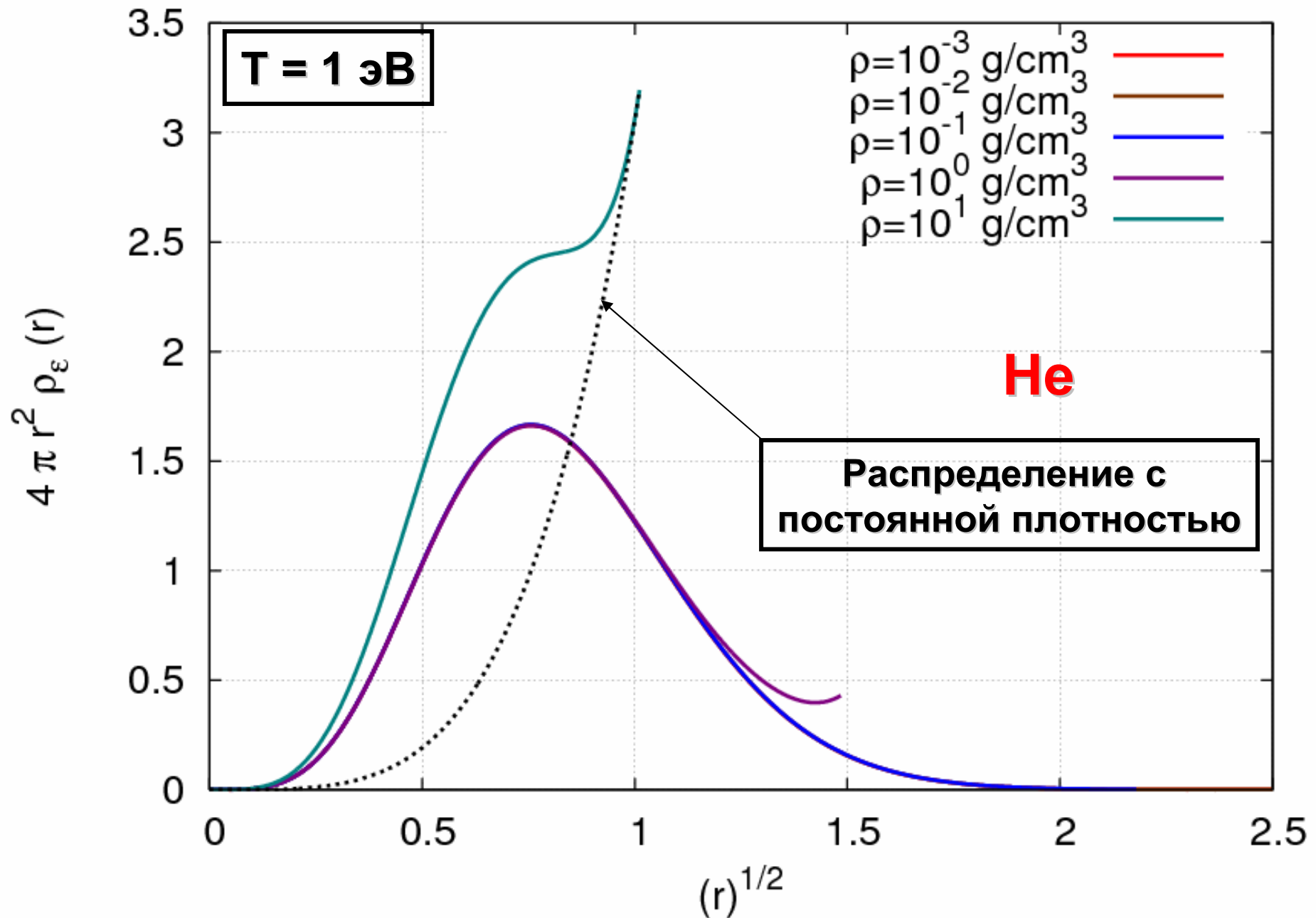


Средняя ионизация



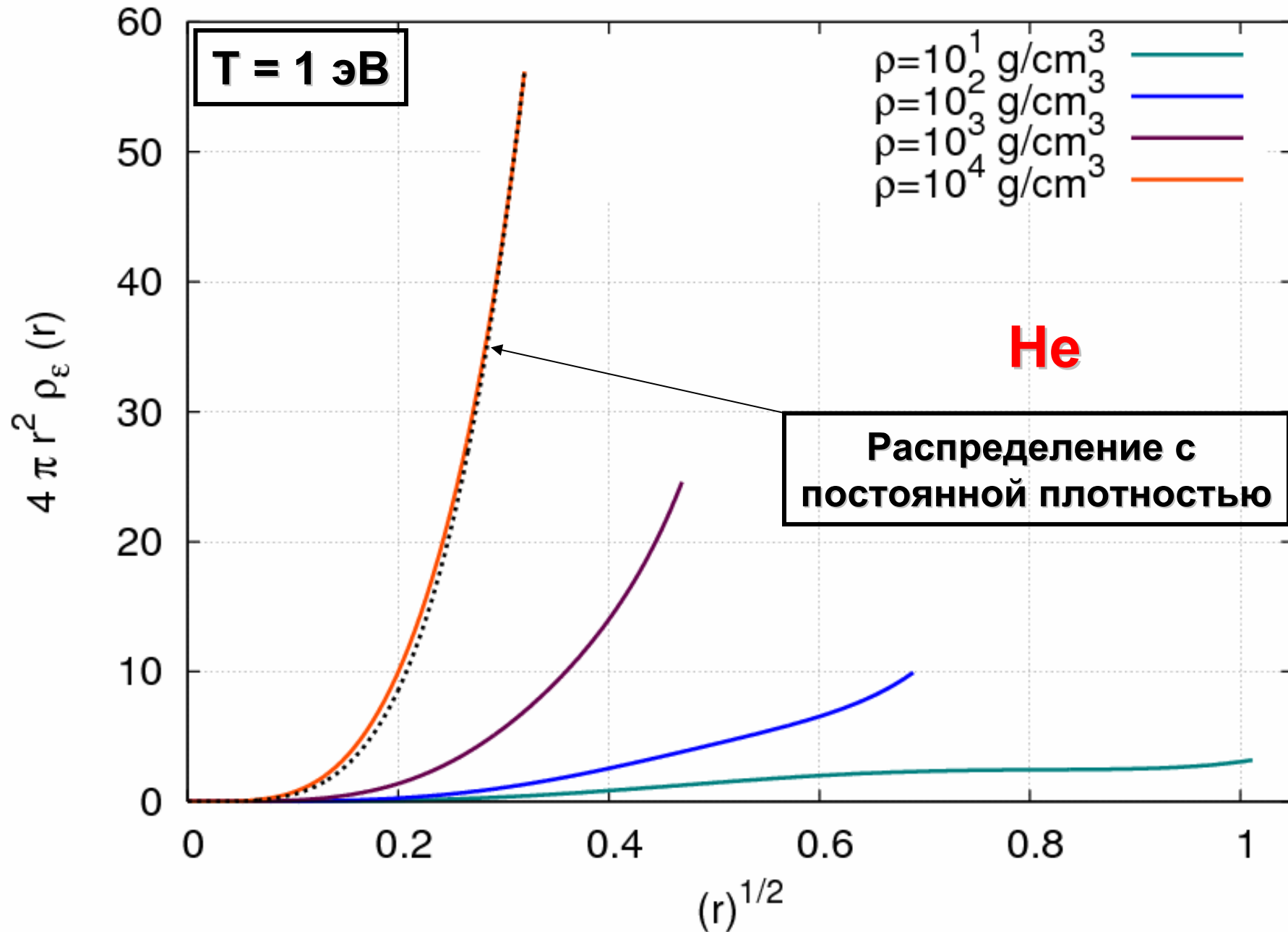


Распределение электронов по радиусу ячейки r



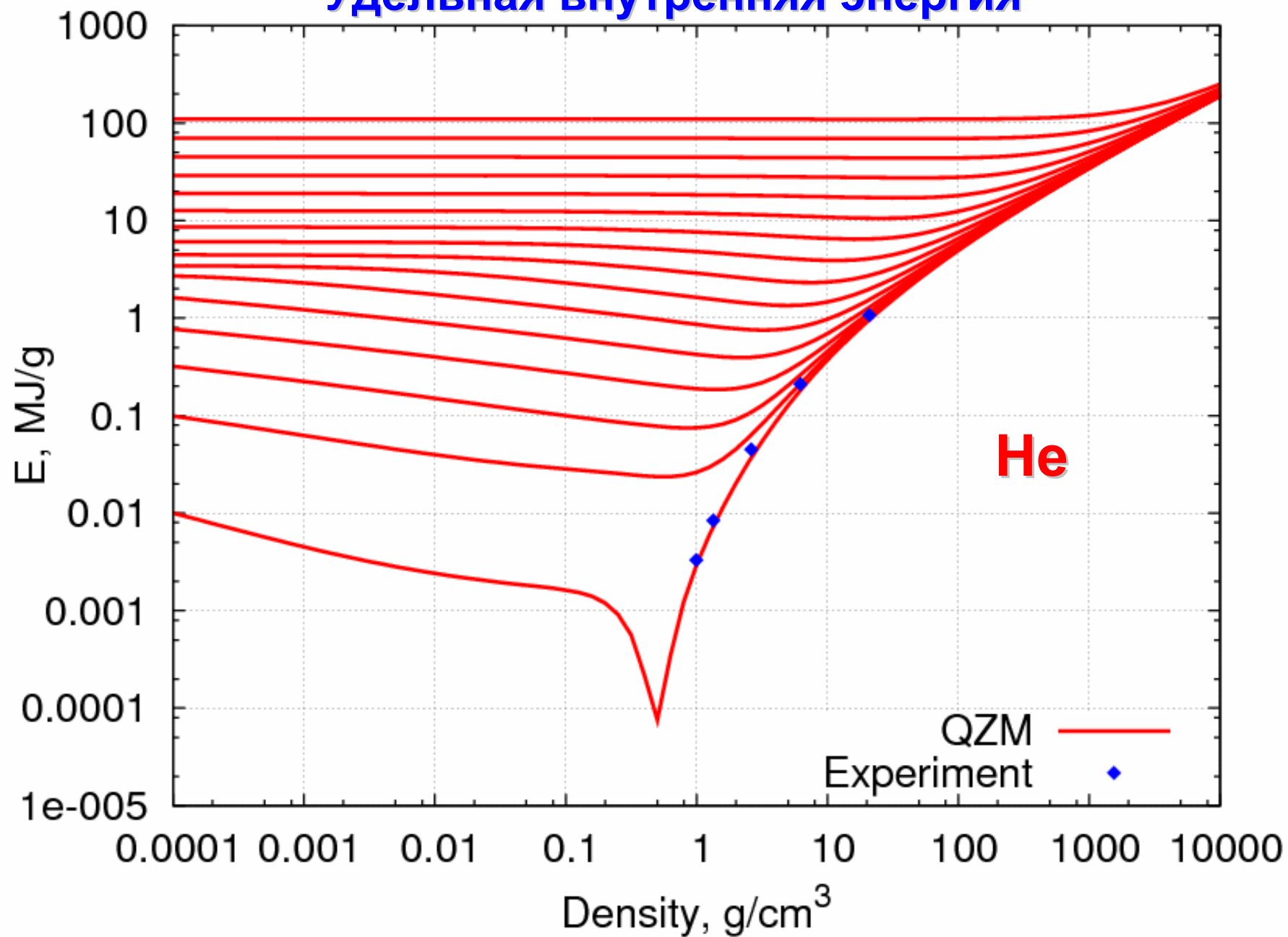


Распределение электронов по радиусу ячейки r



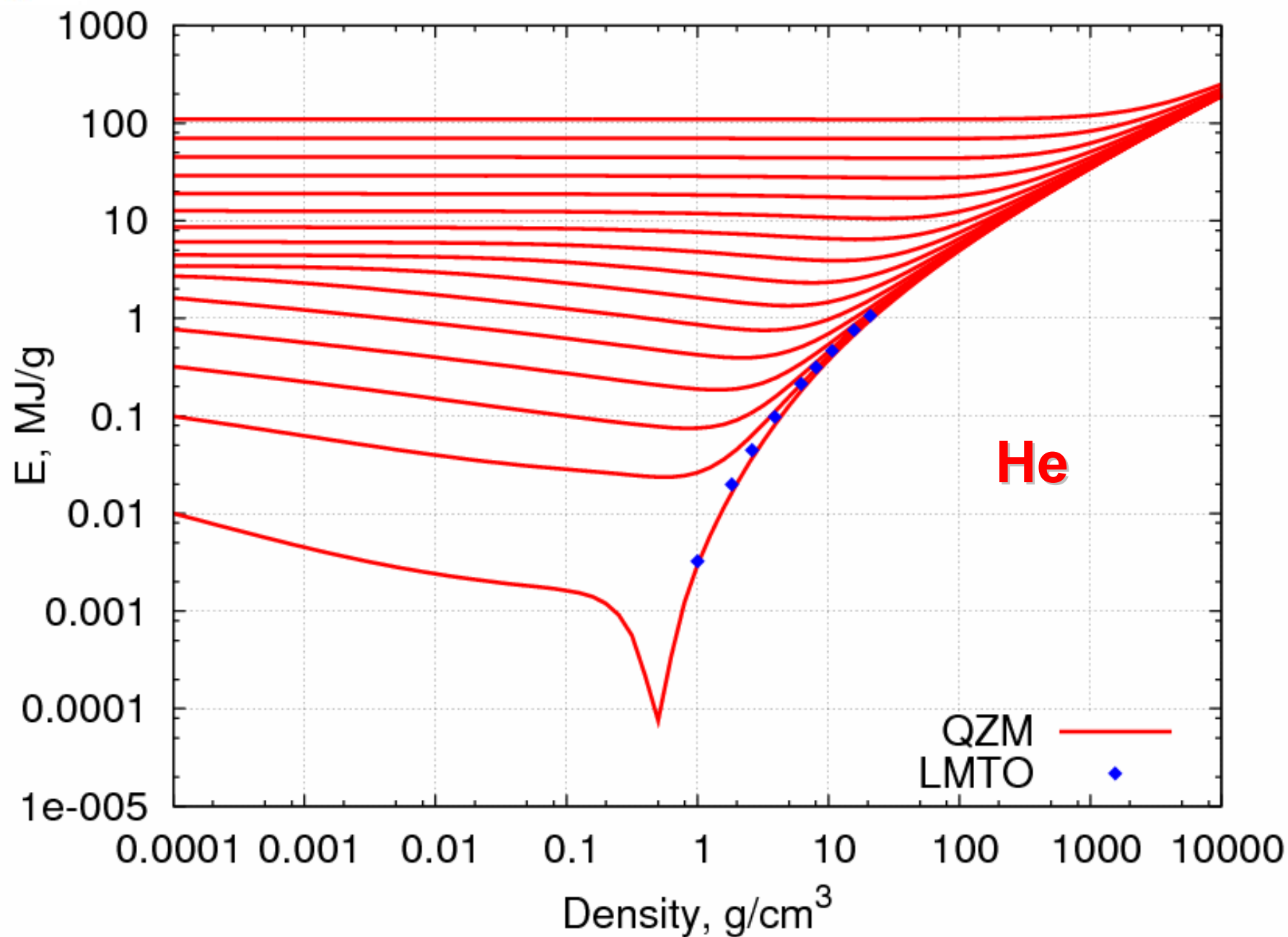


Сравнение с экспериментом: Удельная внутренняя энергия



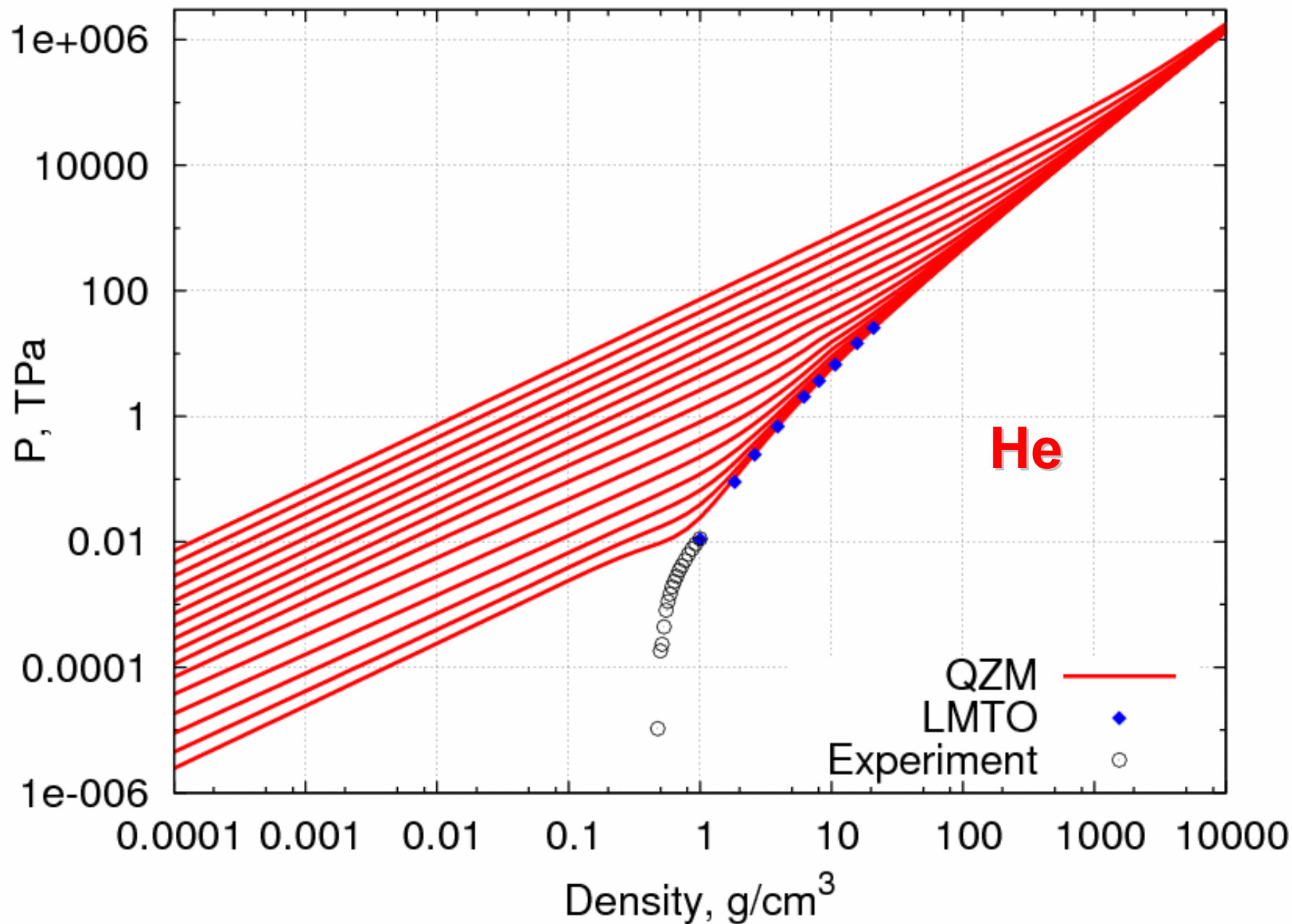


Сравнение с ЛМТО: Удельная внутренняя энергия



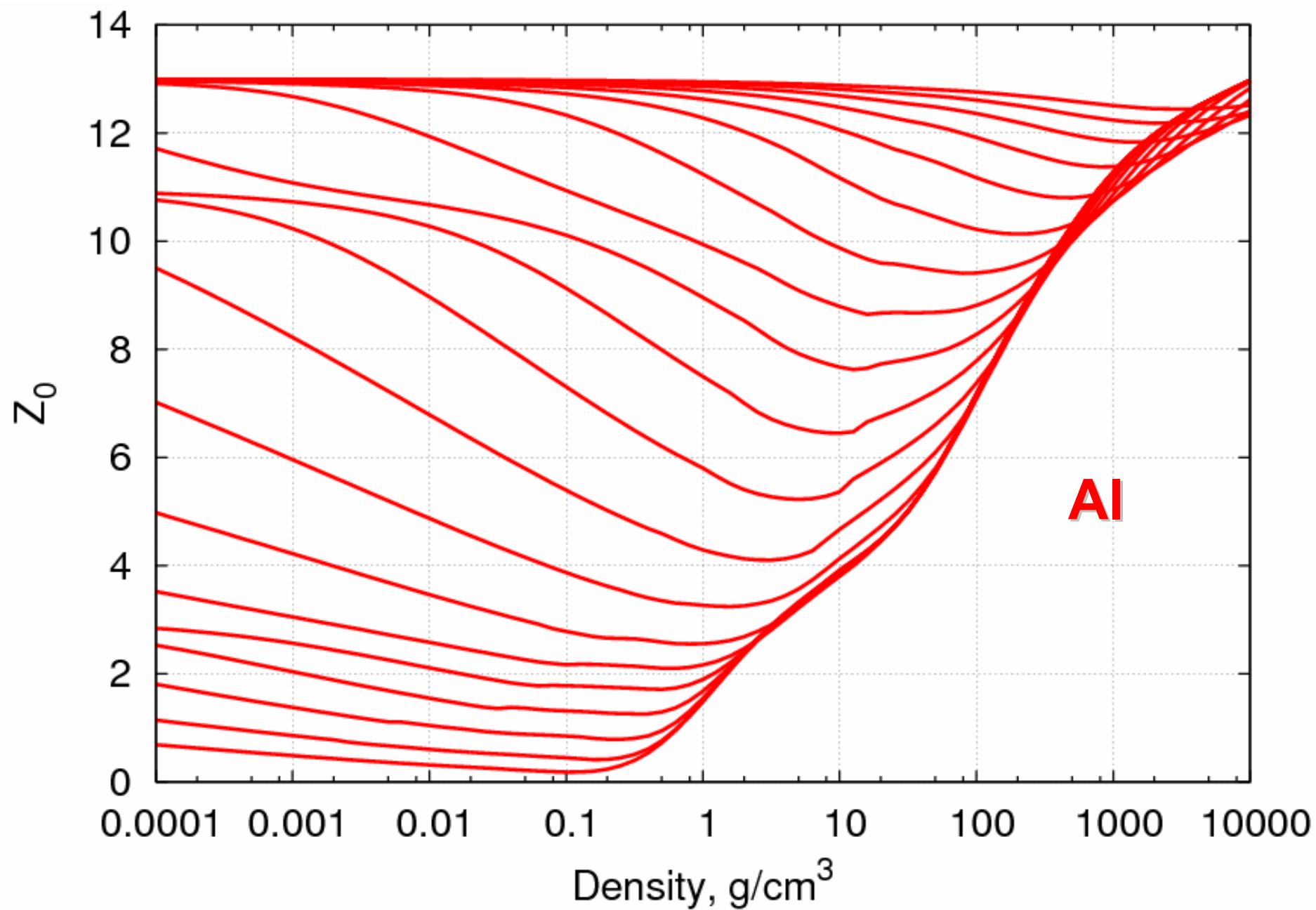


Сравнение с ЛМТО и экспериментом: Давление



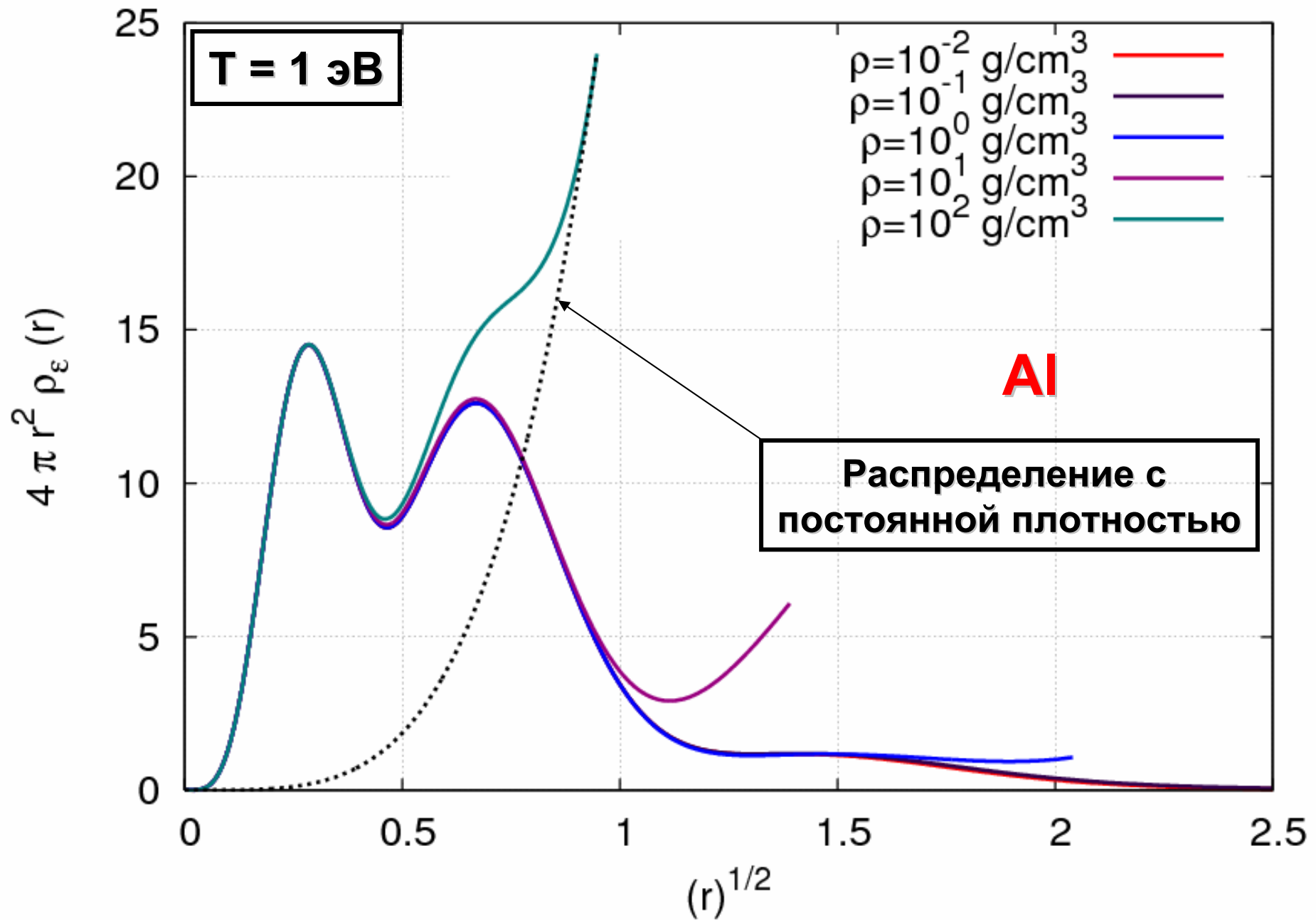


Средняя ионизация



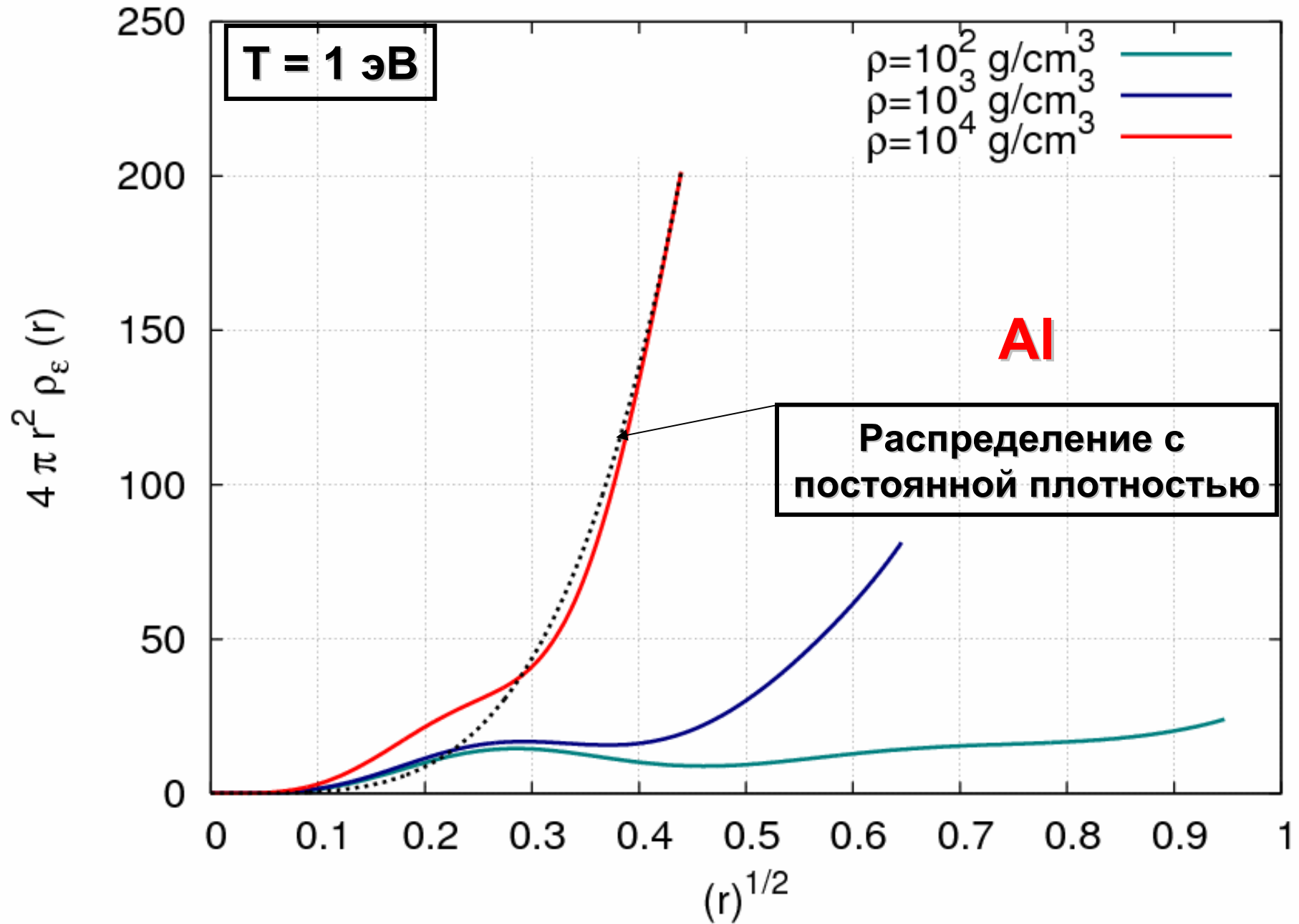


Распределение электронов по радиусу ячейки r



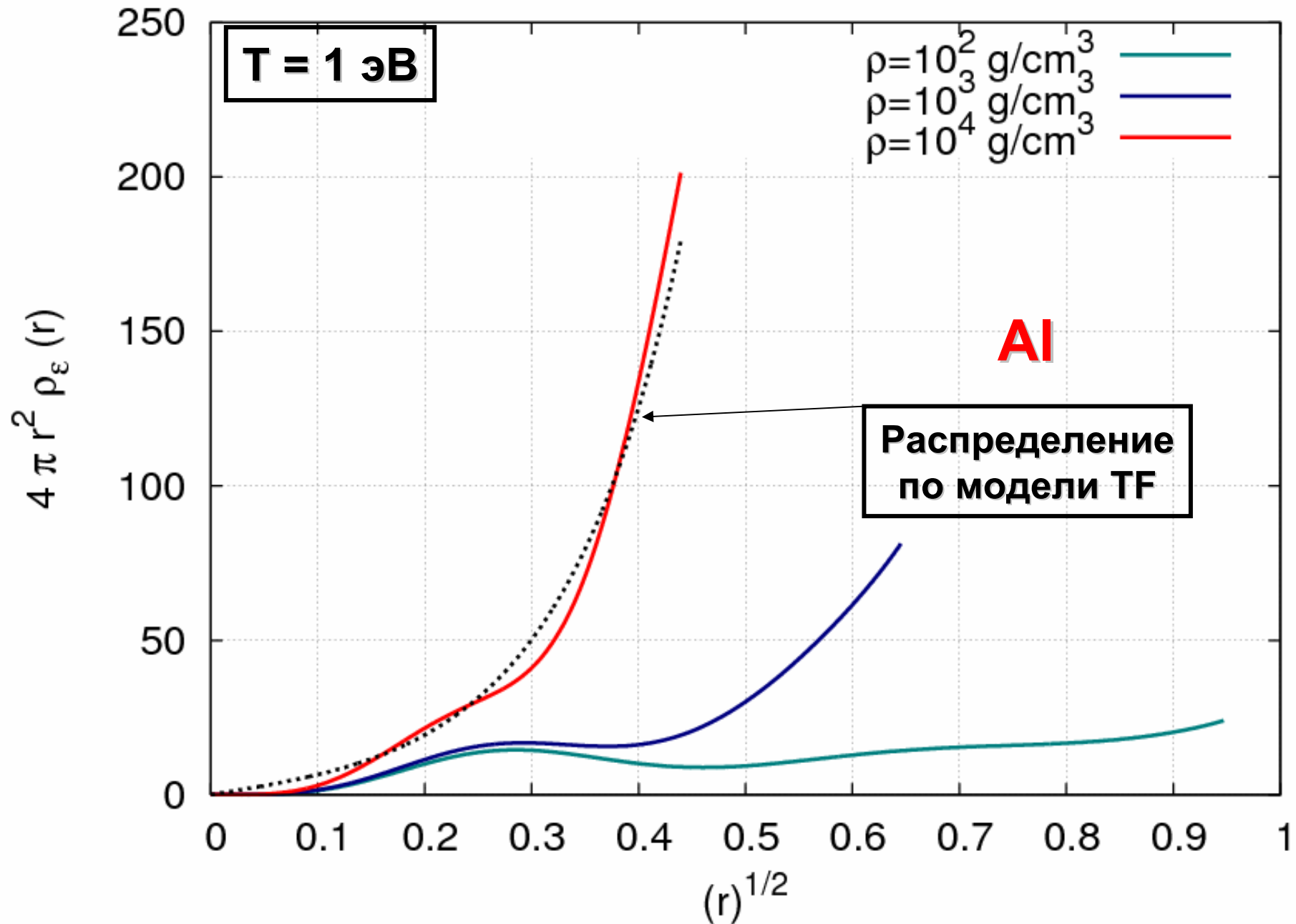


Распределение электронов по радиусу ячейки r



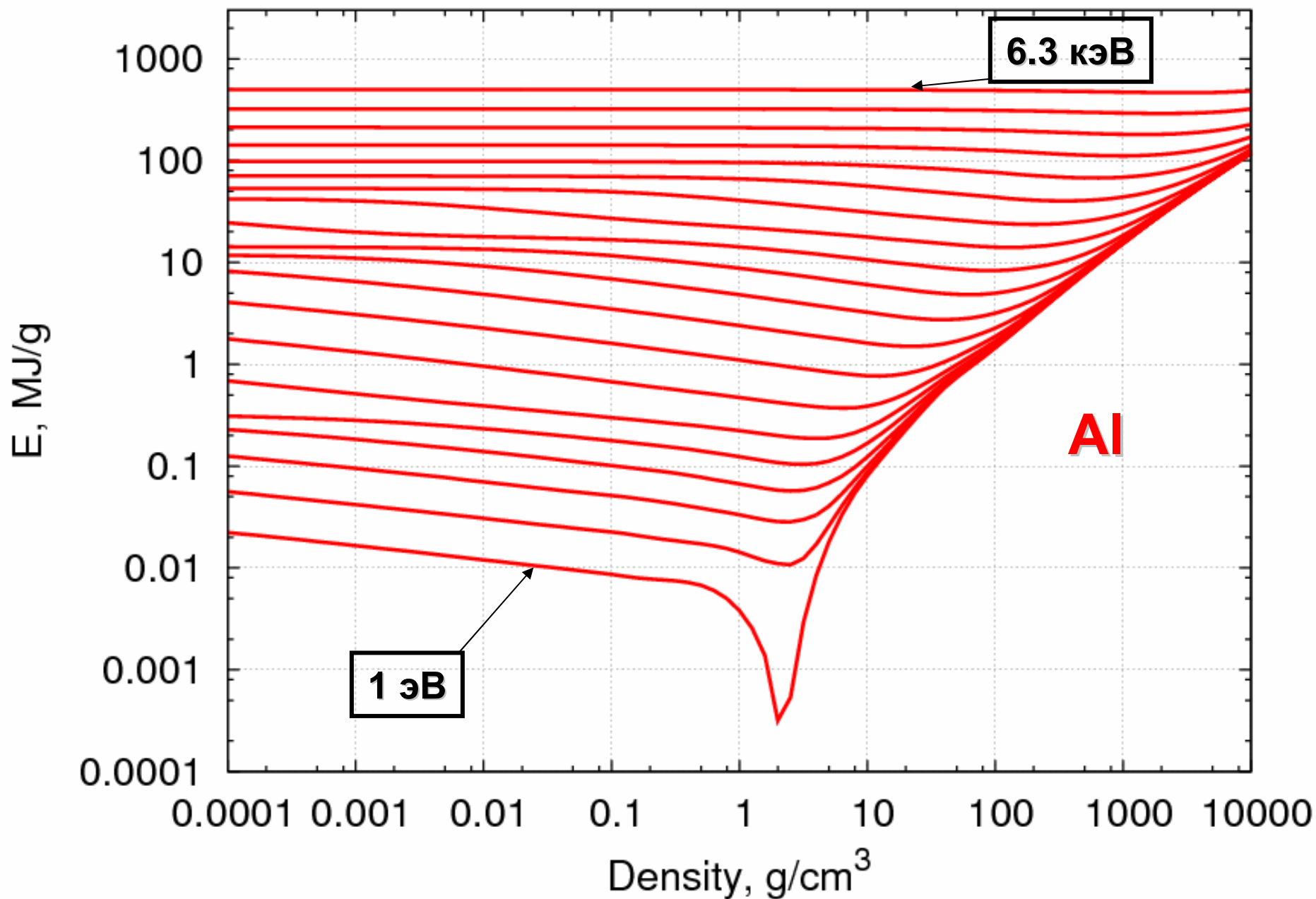


Распределение электронов по радиусу ячейки r



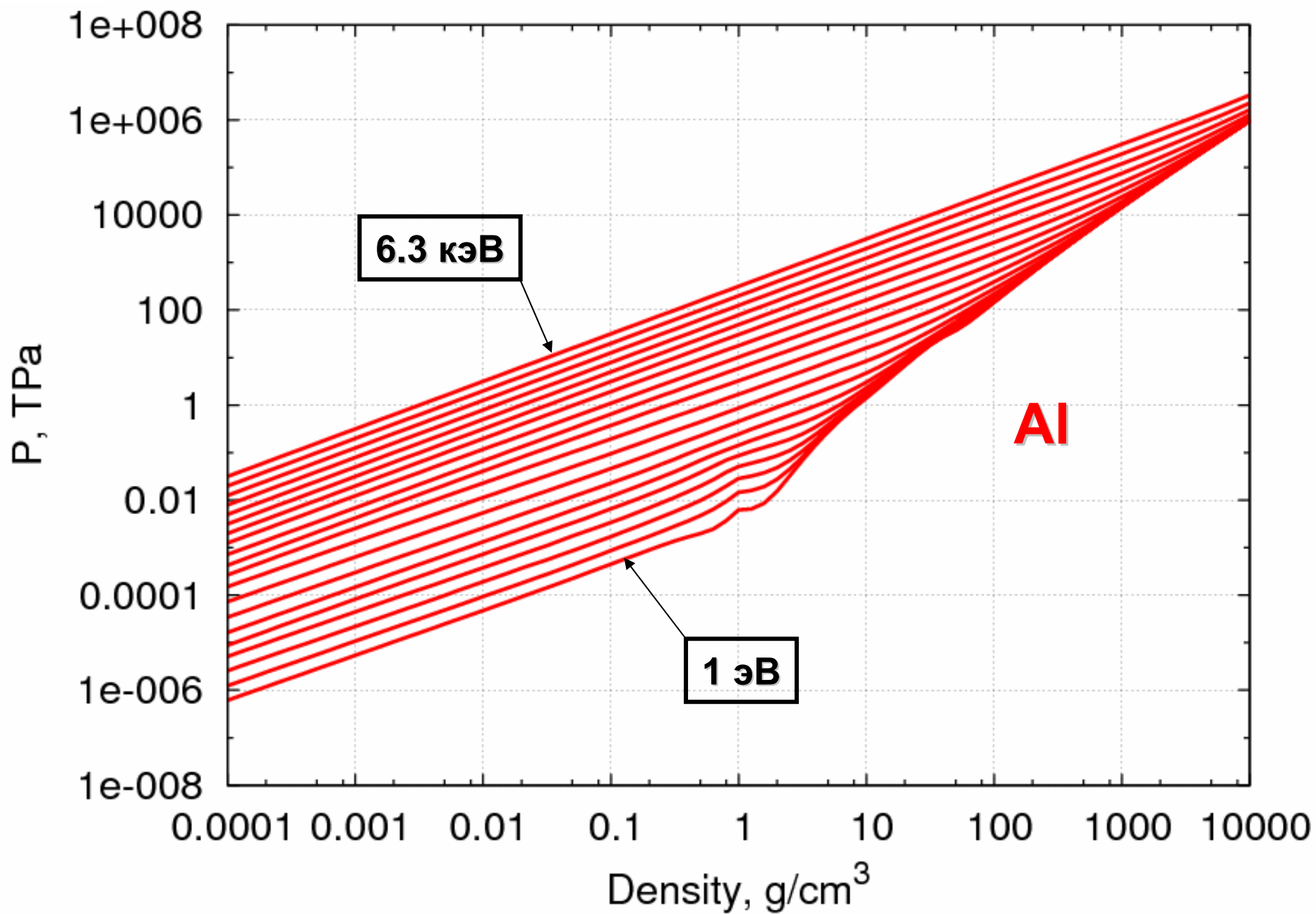


Удельная внутренняя энергия



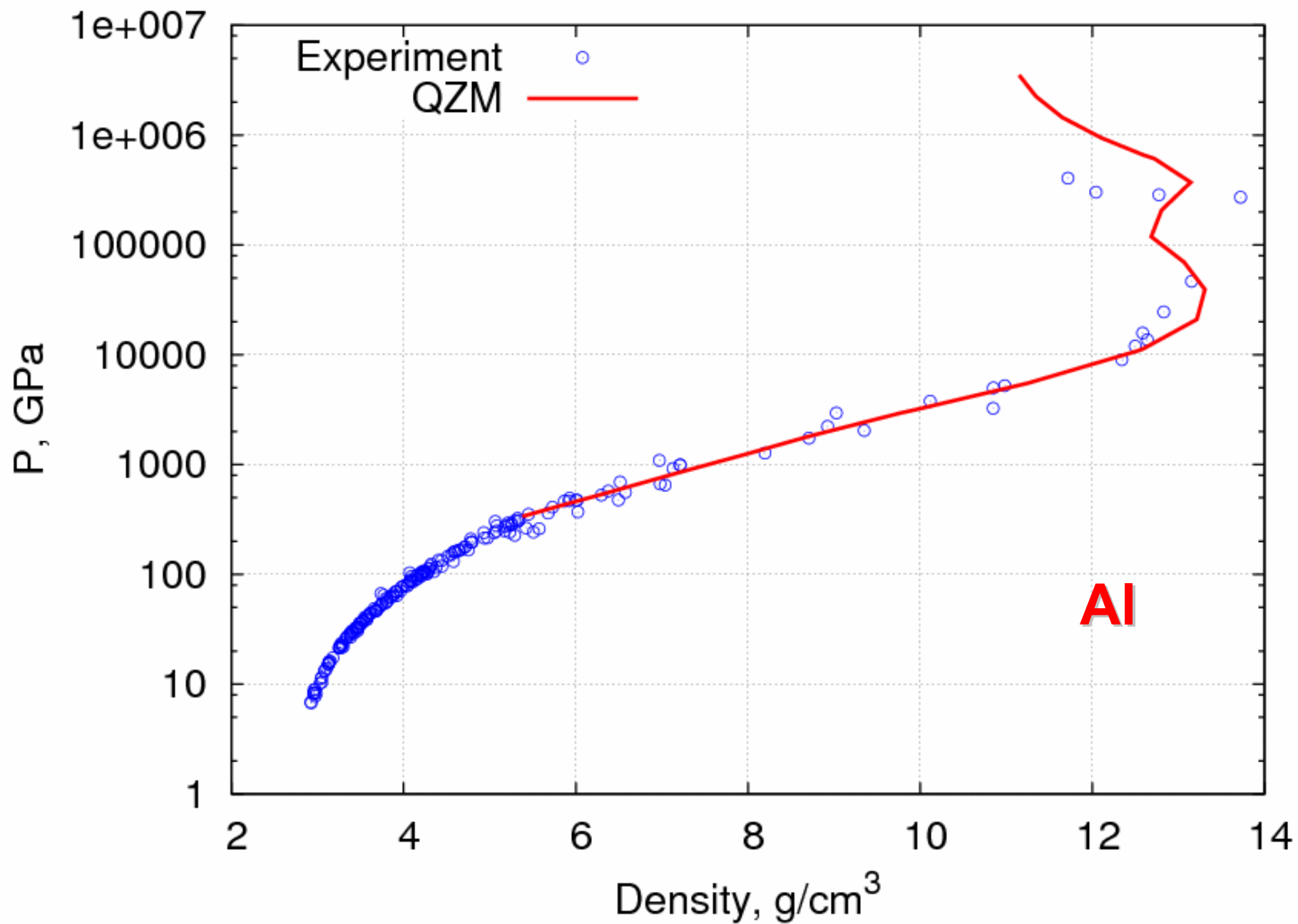


Давление



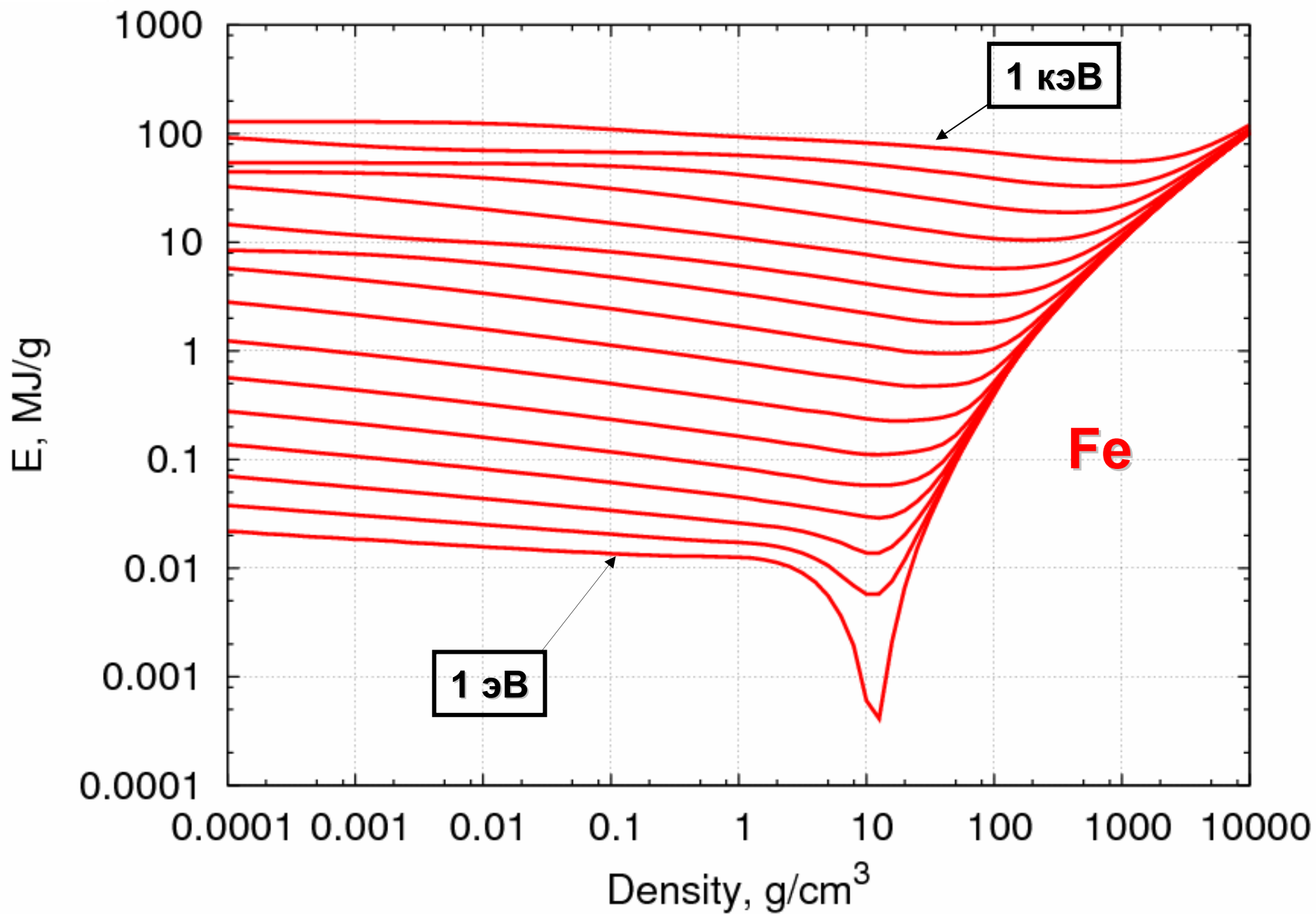


Ударная адиабата от нормальной плотности



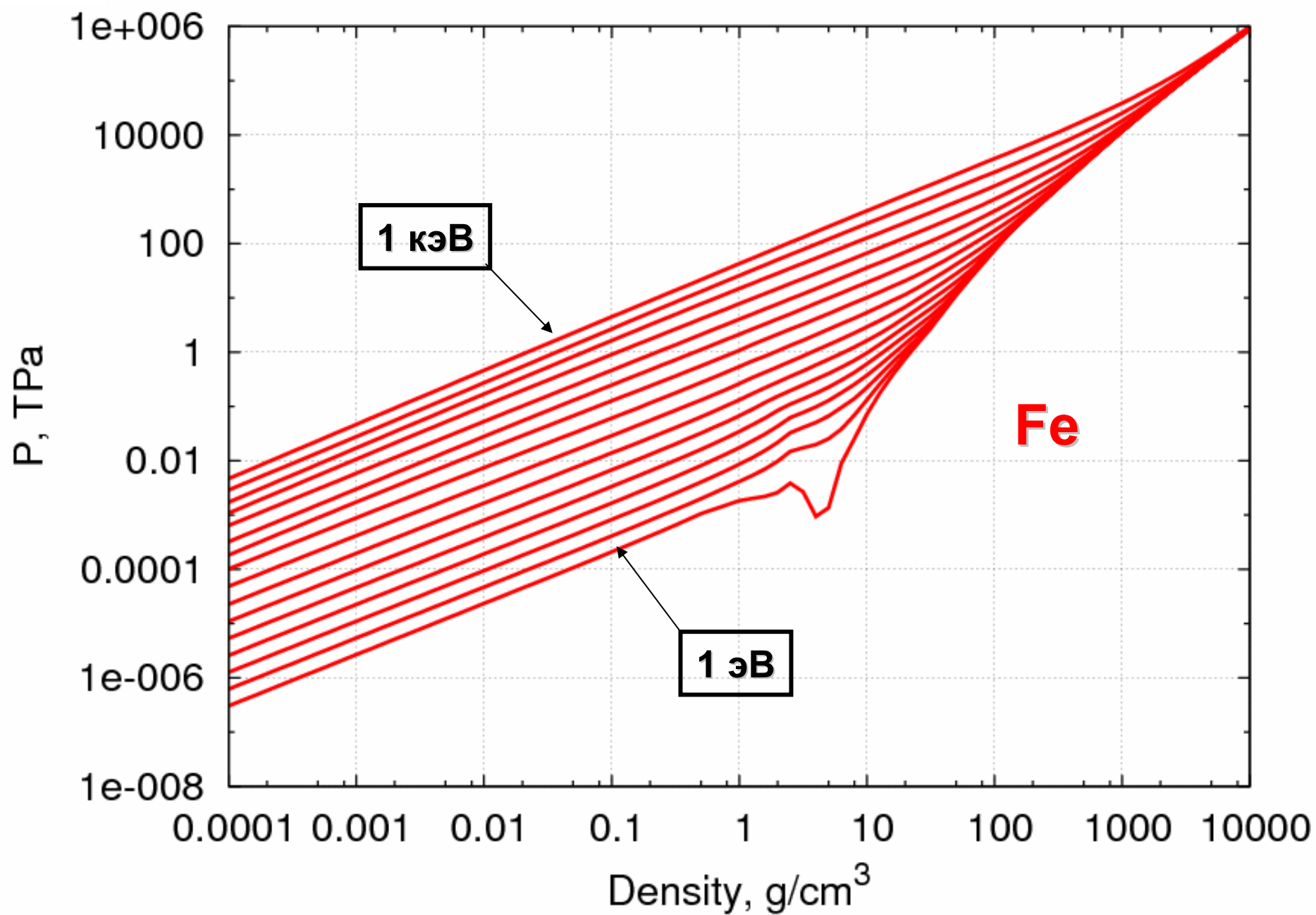


Удельная внутренняя энергия



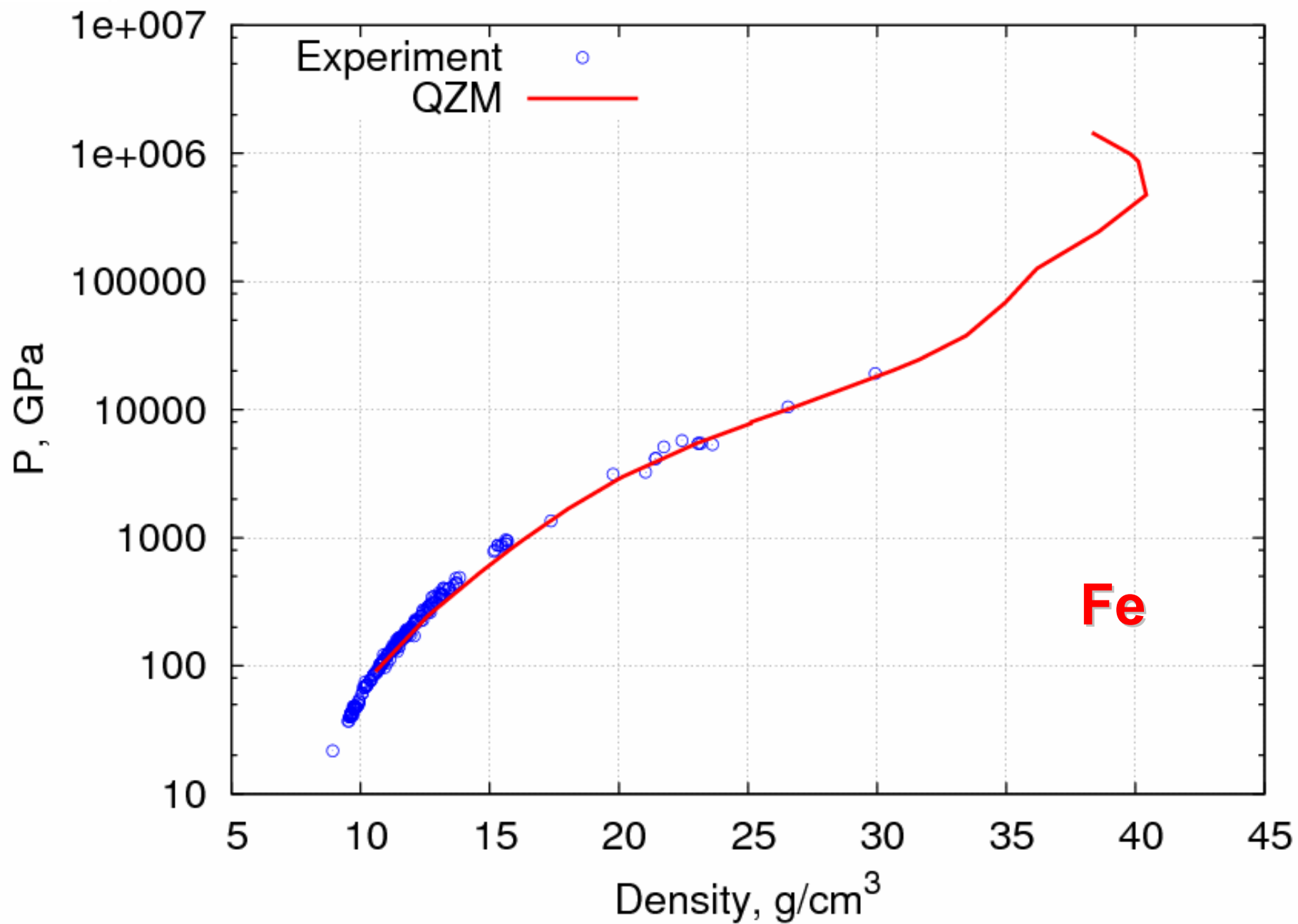


Давление



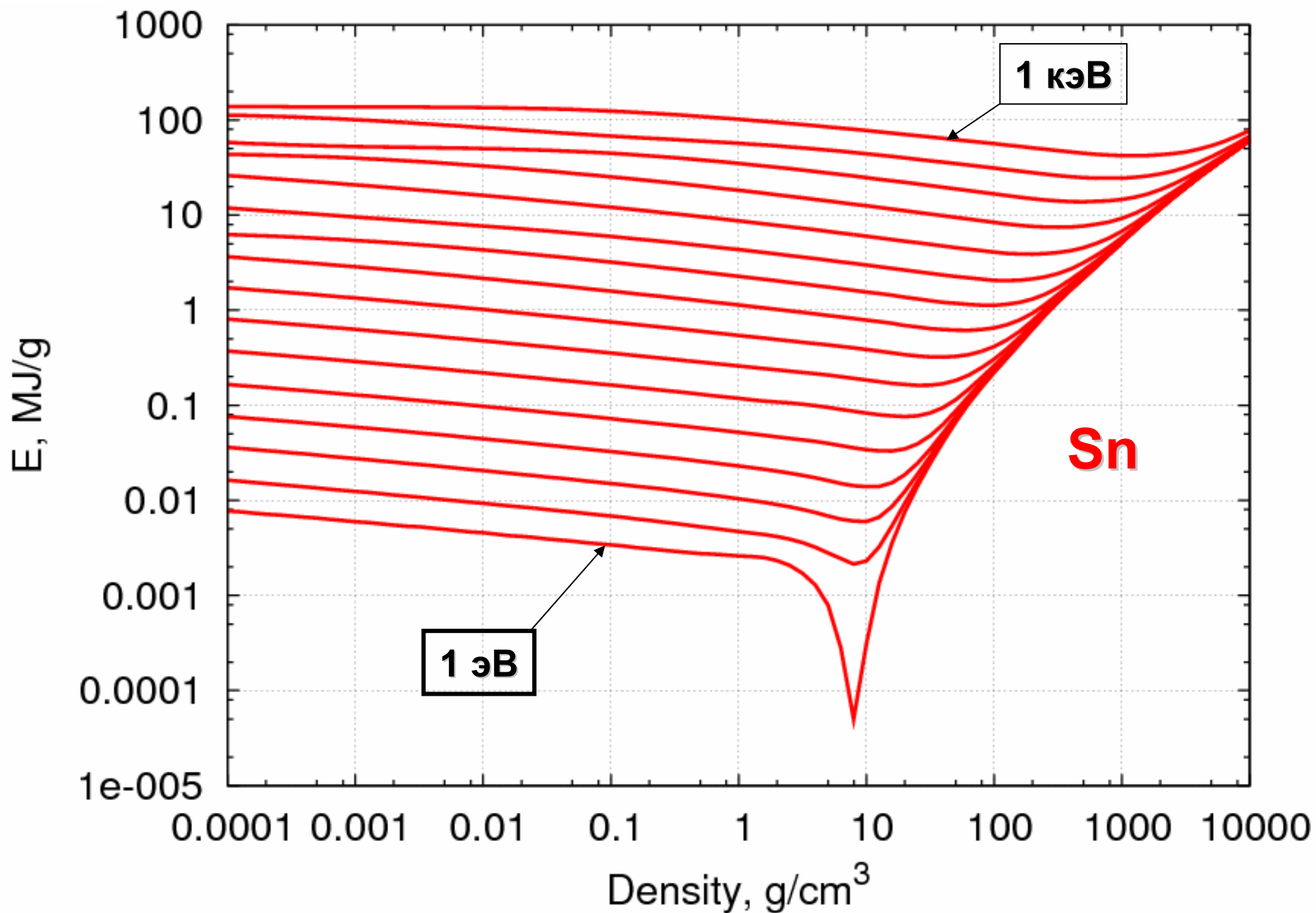


Ударная адиабата от нормальной плотности



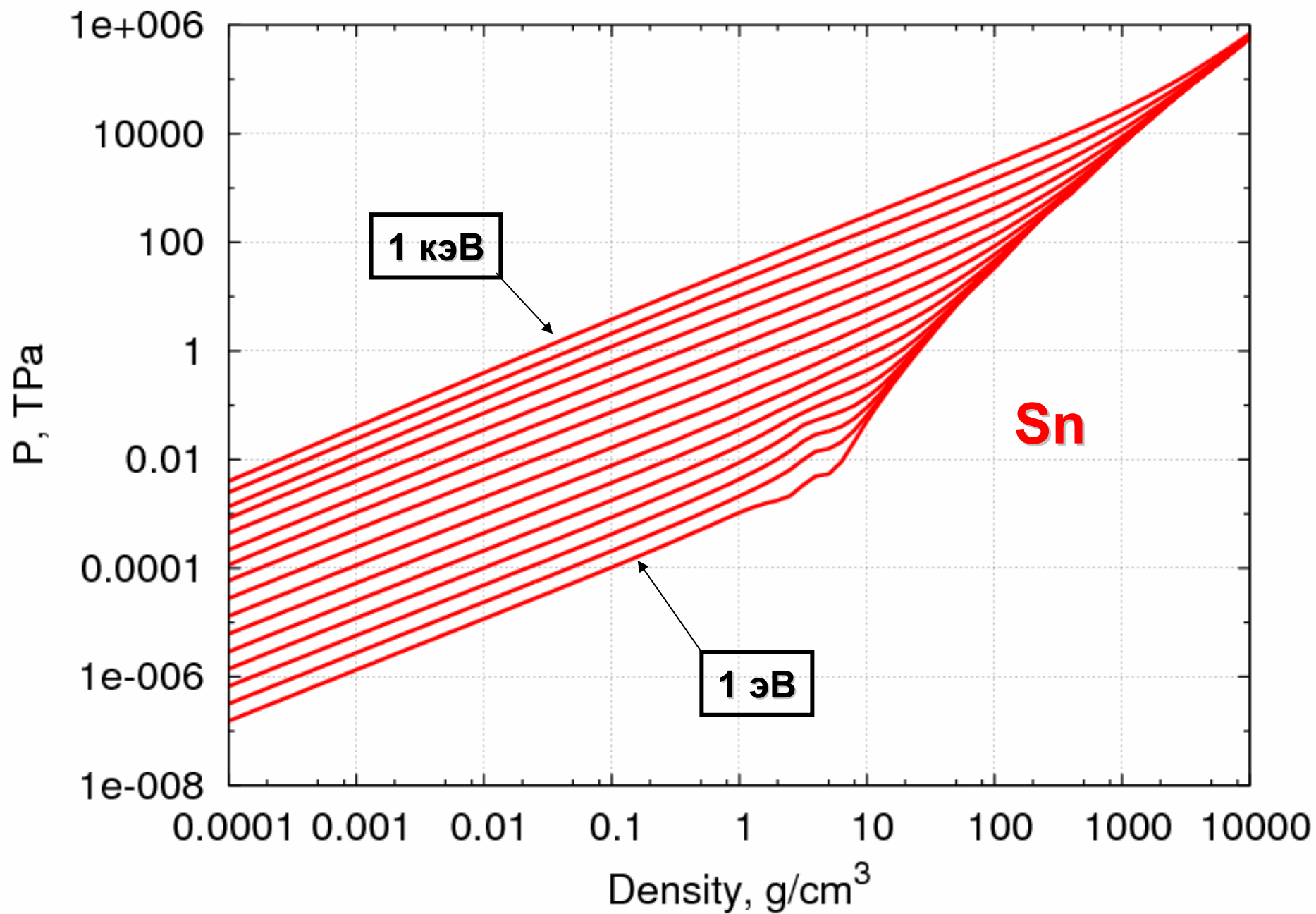


Удельная внутренняя энергия



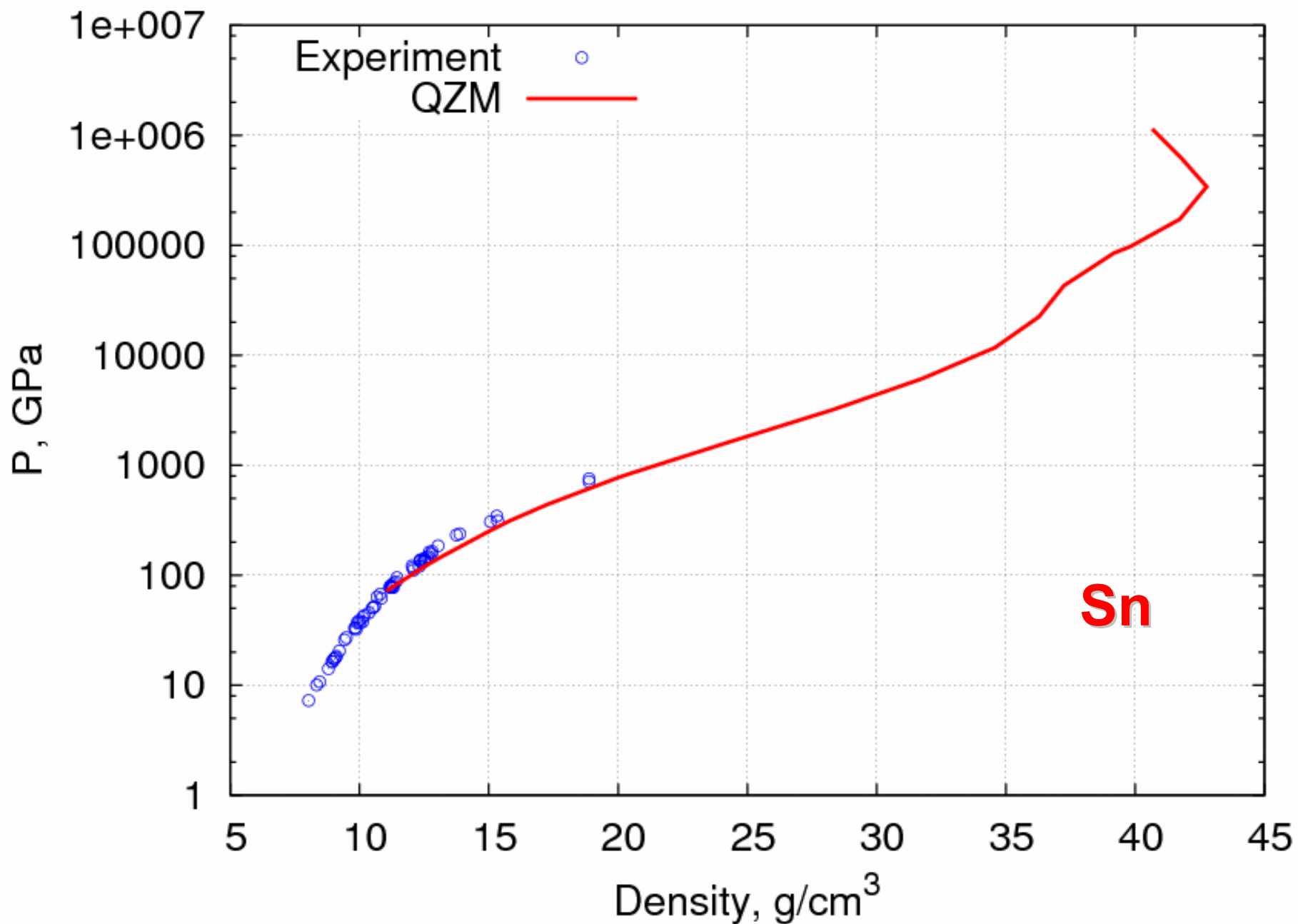


Давление



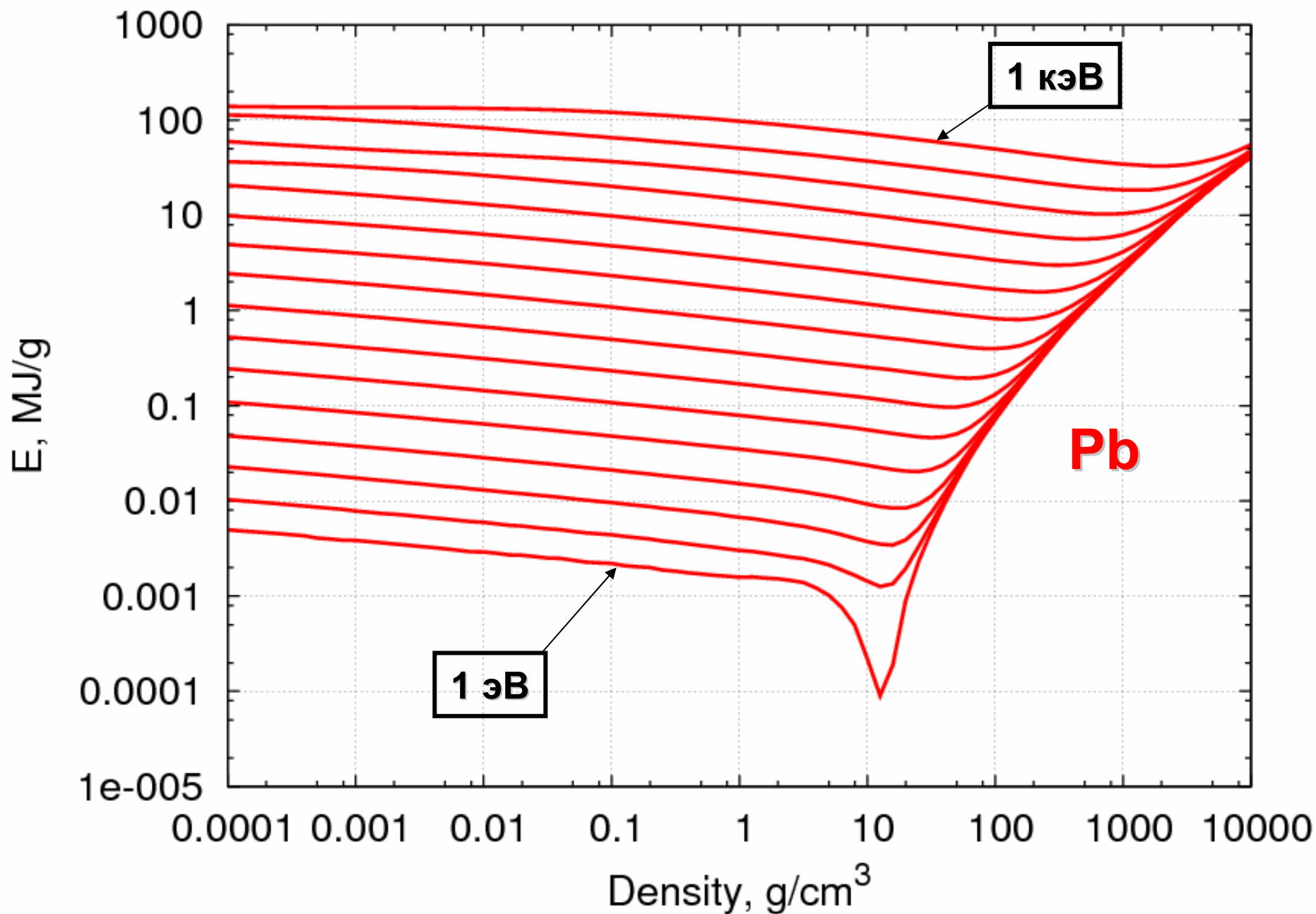


Ударная адиабата от нормальной плотности



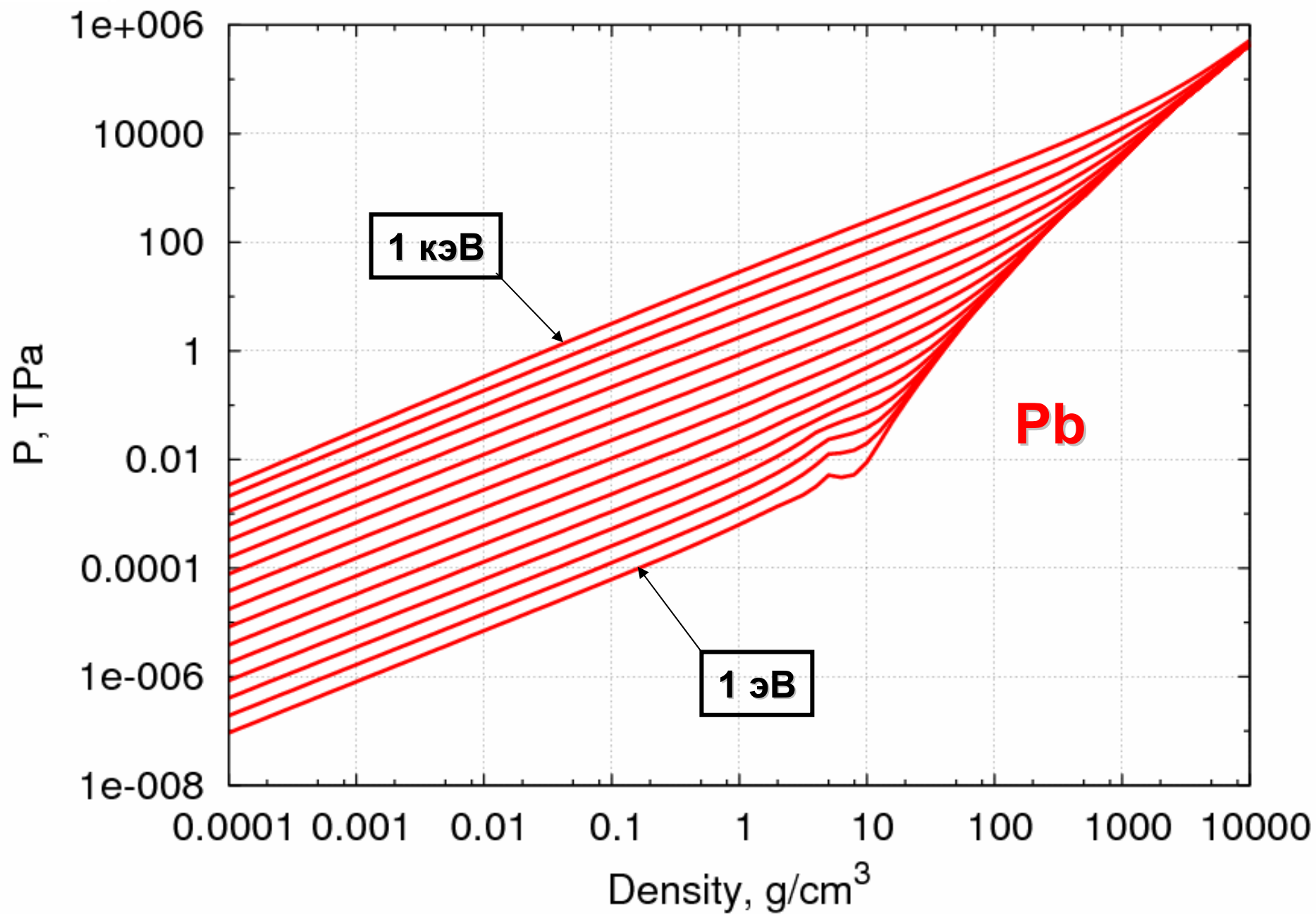


Удельная внутренняя энергия



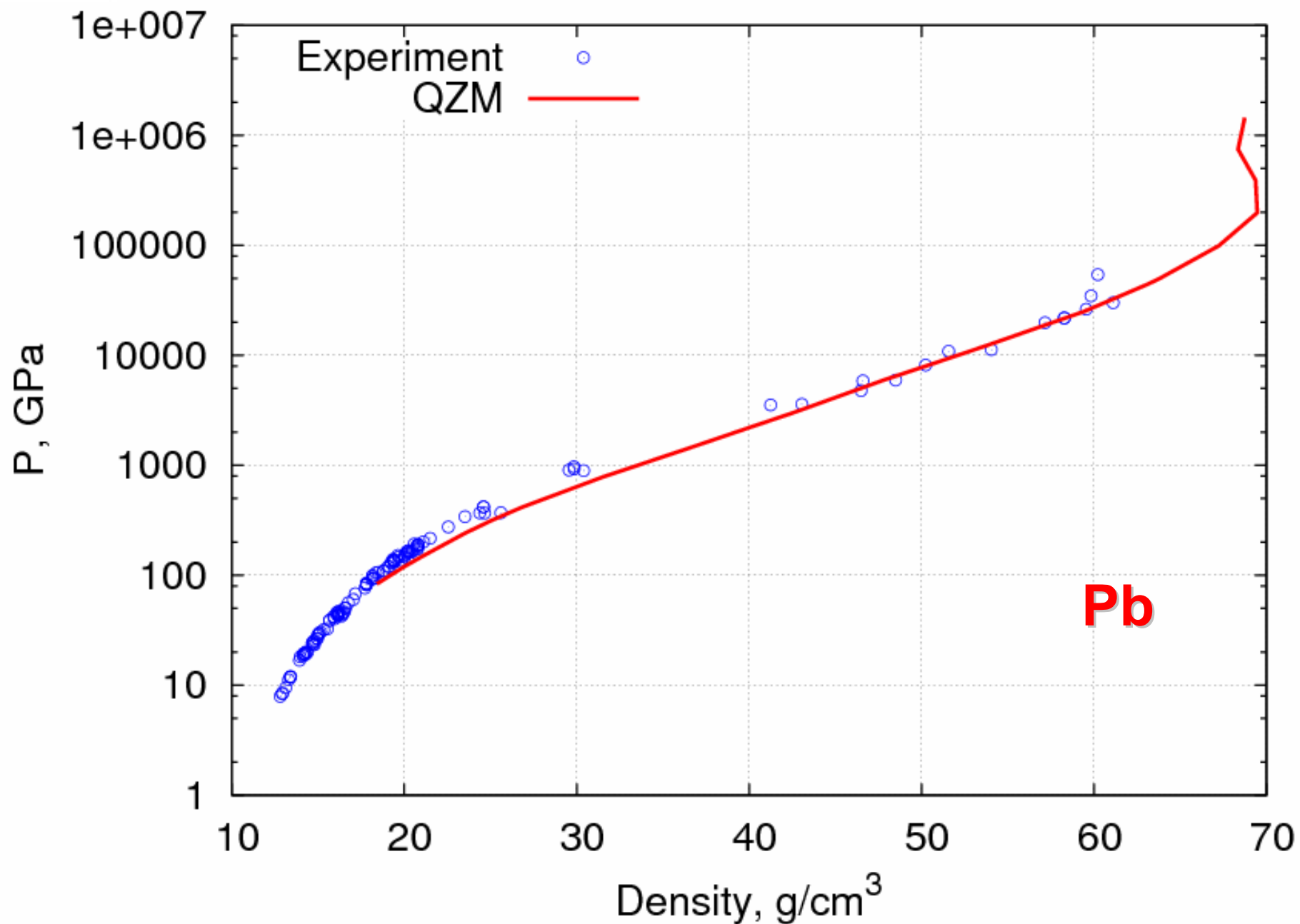


Давление





Ударная адиабата от нормальной плотности





Заключение

- Предложенная модель QZM показывает хорошее соответствие с экспериментальными данными.
- Позволяет проводить расчёты по единой модели в широком диапазоне температур и плотностей.
- Получать гладкие термодинамические функции, существенно уточняя модель ХФС в области высоких плотностей.
- Предоставляет детальную информацию об энергетическом спектре электронов, которую можно использовать для дальнейших расчётов различных характеристик высокотемпературной плотной плазмы.
- Работа выполнена при поддержке РФФИ 05-02-00682 и программы Президиума РАН № 14 “Фундаментальные проблемы информатики и информационных технологий” раздел 2: “Высокопроизводительные вычисления и многопроцессорные системы”, рук. А.В. Забродин, В.К. Левин.



Ссылки

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.
2. <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>