

RESEOS – уравнение состояния по модели ограниченного атома

Овечкин А.А., Новиков В.Г., Грушин А.С.

Институт прикладной математики им.М.В.Келдыша РАН

При описании энергетического спектра электронов в моделях самосогласованного поля наибольшие трудности вызывает учёт промежуточных состояний между связанными состояниями, локализованными в пределах атомной ячейки, и состояниями непрерывного спектра, описываемыми в рамках квазиклассического приближения. В модели ограниченного атома [1] важную роль для описания таких состояний играют резонансы плотности состояний в непрерывном спектре. Резонансы связаны с квазистационарными состояниями и возникают при выдавливании дискретных уровней энергии в непрерывный спектр с увеличением плотности вещества [2,3]. В области перехода электрона из дискретного в непрерывный спектр вклад резонанса в плотность состояний близок к вкладу соответствующего дискретного уровня. Это приводит к плавному поведению термодинамических величин при ионизации давлением [4,5].

Разработан алгоритм расчёта самосогласованного атомного потенциала с учётом резонансов. Проведены расчёты уравнения состояния алюминия и урана в широком интервале температур и плотностей. Полученные результаты сопоставлены с результатами по модели Хартри-Фока-Слэтера с учётом зонной структуры спектра (квазизонной модели) и с экспериментальными данными.

1. Liberman D.A., Phys. Rev. B 20, 1979, p. 4981.
2. More R.M., Advances in atomic and molecular physics 21, 1985, p. 305.
3. Wilson B., Sonnad V., Isaacs W., JQSRT 99, 2006, p.658.
4. Novikov V.G., Grushin A.S., Ovechkin A.A., in Physics of Extreme States of Matter-2009, 2009, p. 157.
5. Новиков В.Г., Овечкин А.А., ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, препринт №31, 2009.