



RESEOS – уравнение состояния по модели ограниченного атома

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

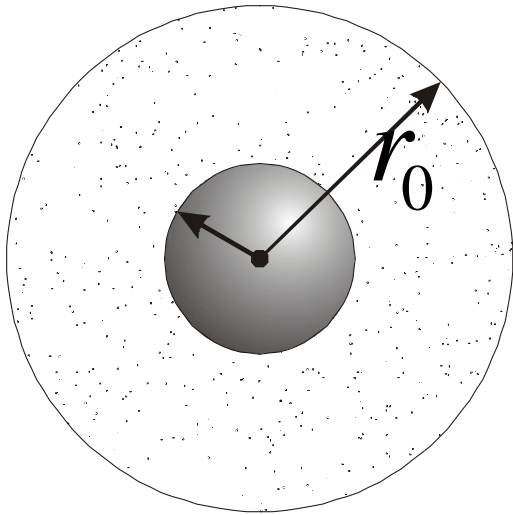
*Институт Прикладной Математики им М.В. Келдыша РАН
Московский Инженерно-Физический Институт*

**Научно-координационная сессия «Исследования неидеальной плазмы»
Москва, 2009**

1



Модель самосогласованного поля



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

$$-ic(\vec{\alpha}\nabla) \Psi_\nu(\vec{r}) = \left(\varepsilon_\nu + \overset{\text{или}}{V(\vec{r})} - c^2(\beta - 1) \right) \Psi_\nu(\vec{r})$$

$$\rho(\vec{r}) = \sum_\nu N_\nu |\Psi_\nu(\vec{r})|^2$$

**Приближение
среднего атома**

$$N_\nu = \frac{1}{1 + \exp \frac{\varepsilon_\nu - \mu}{kT}}$$

$$\frac{4}{3} \pi r_0^3 n = 1$$

$$\Delta V_c(\vec{r}) = 4\pi \rho(\vec{r})$$



Граничные условия для волновых функций в моделях ограниченного атома

INFERNO

(Д. Либерман, 1979)

$$R_{nl}(0) = 0$$

$$R_{nl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

$$R_{\epsilon l} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin(kr + \varphi_0)$$

В. К. Грязнов и др., 1980

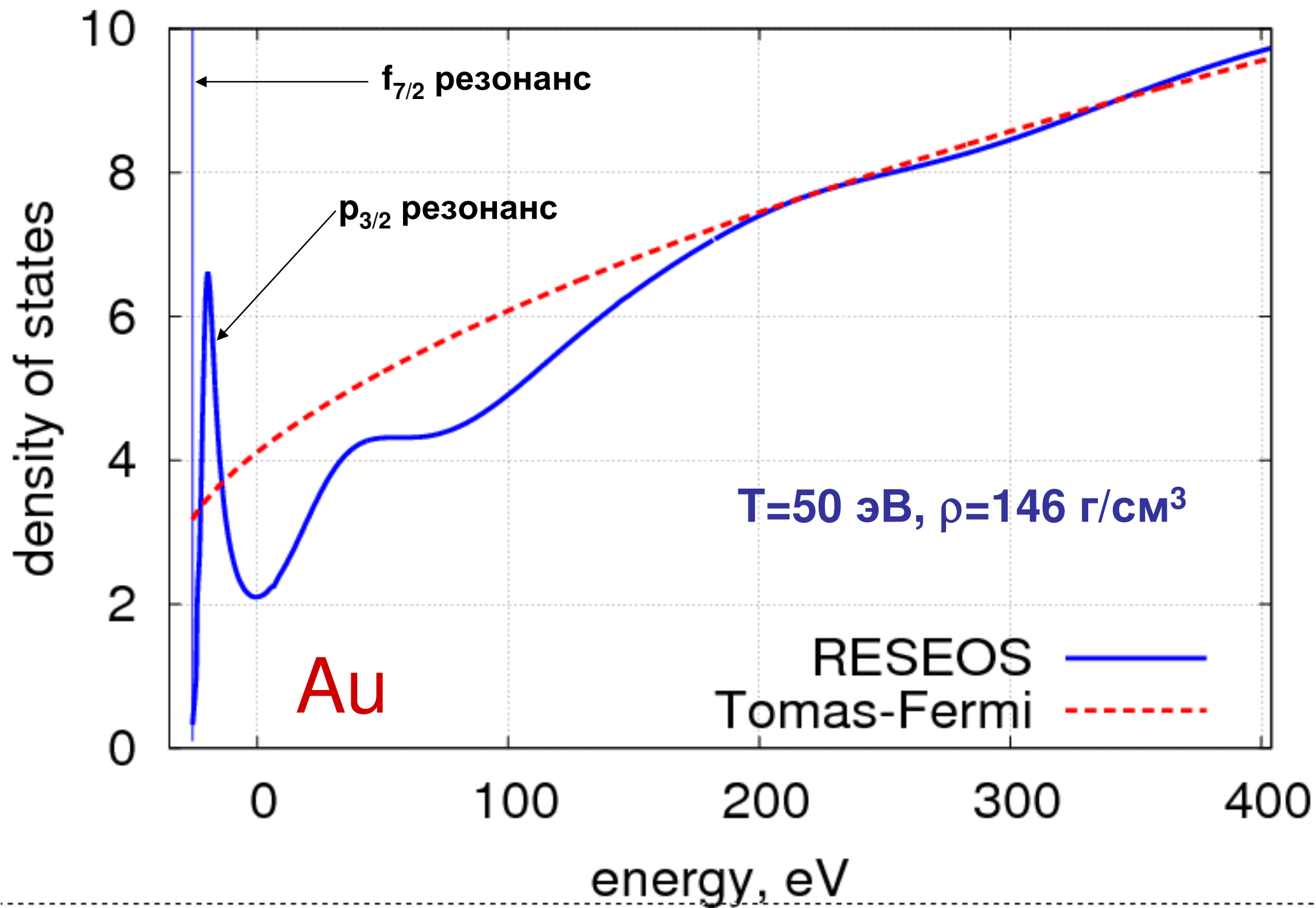
$$R_{nl}(r_0) = 0$$

- Liberman D.A., Phys Rev B, 1979, v.20, p.4981

- Wilson B., Sonnad V., Isaacs W., JQSRT, 2006, v.99, p.658

- Bar-Shalom A., Oreg J., Klapisch M., JQSRT, 2006, v.99, p.35

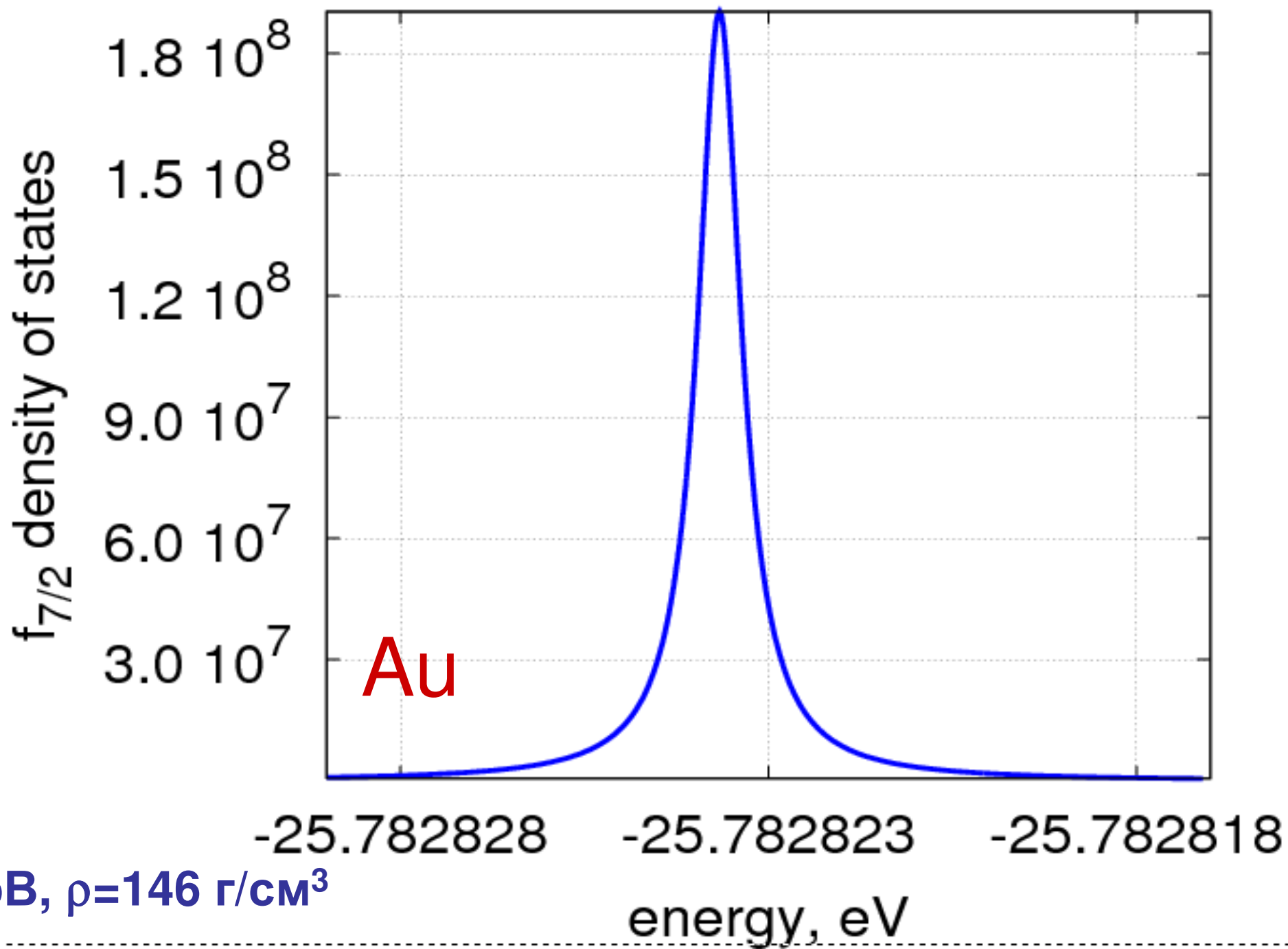
Грязнов В.К., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. ЖЭТФ, 1980, т. 78, №2, с.573



4



Плотность состояний в резонансе $f_{7/2}$

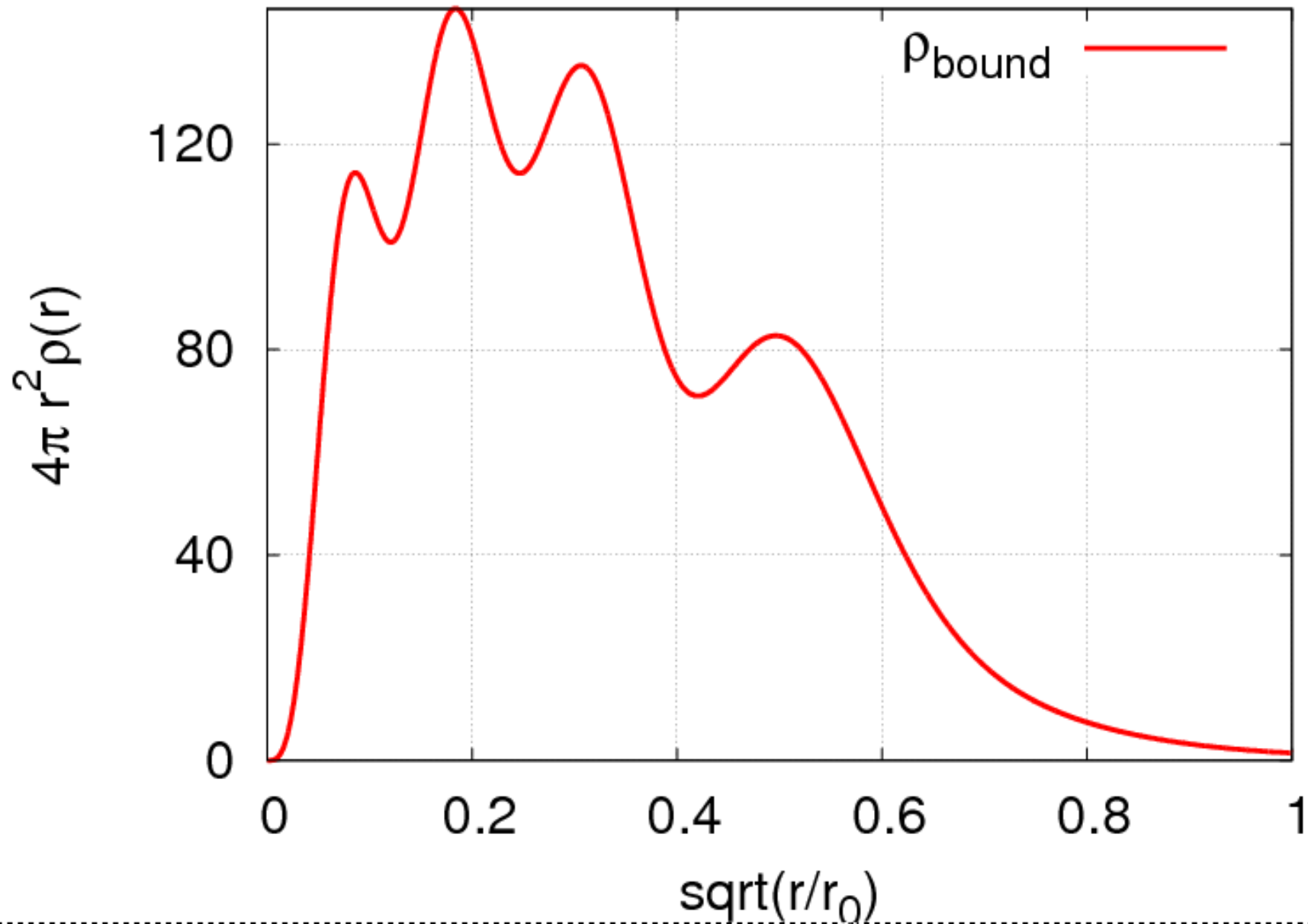


$T=50$ эВ, $\rho=146$ г/см³

5



Электронная плотность до ($\rho=145 \text{ г/см}^3$) и после ($\rho=146 \text{ г/см}^3$) выдавливания дискретного уровня $4f_{7/2}$ в непрерывный спектр



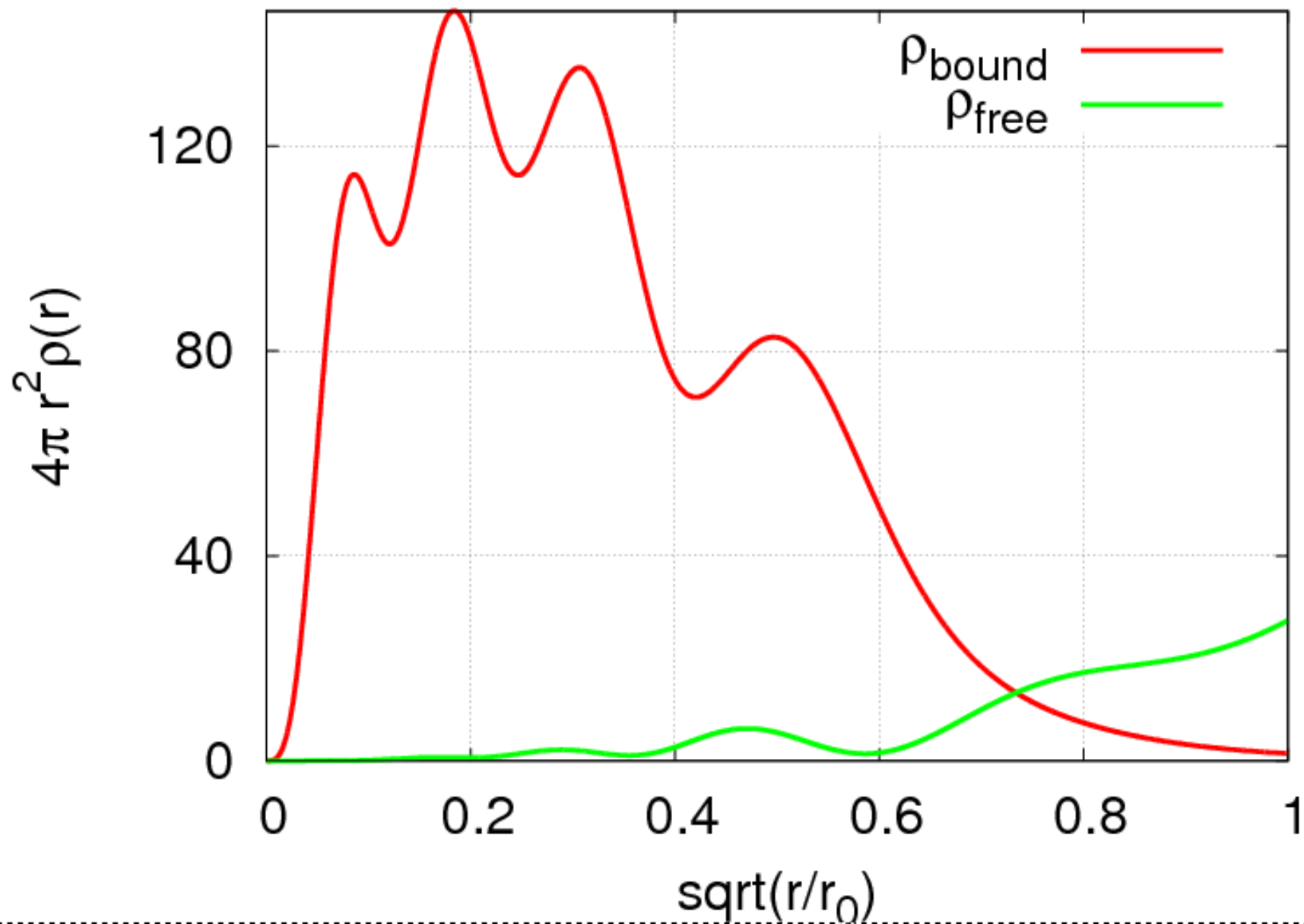
Au

T=50 эВ

6



Электронная плотность до ($\rho=145$ г/см³) и после ($\rho=146$ г/см³) выдавливания дискретного уровня $4f_{7/2}$ в непрерывный спектр



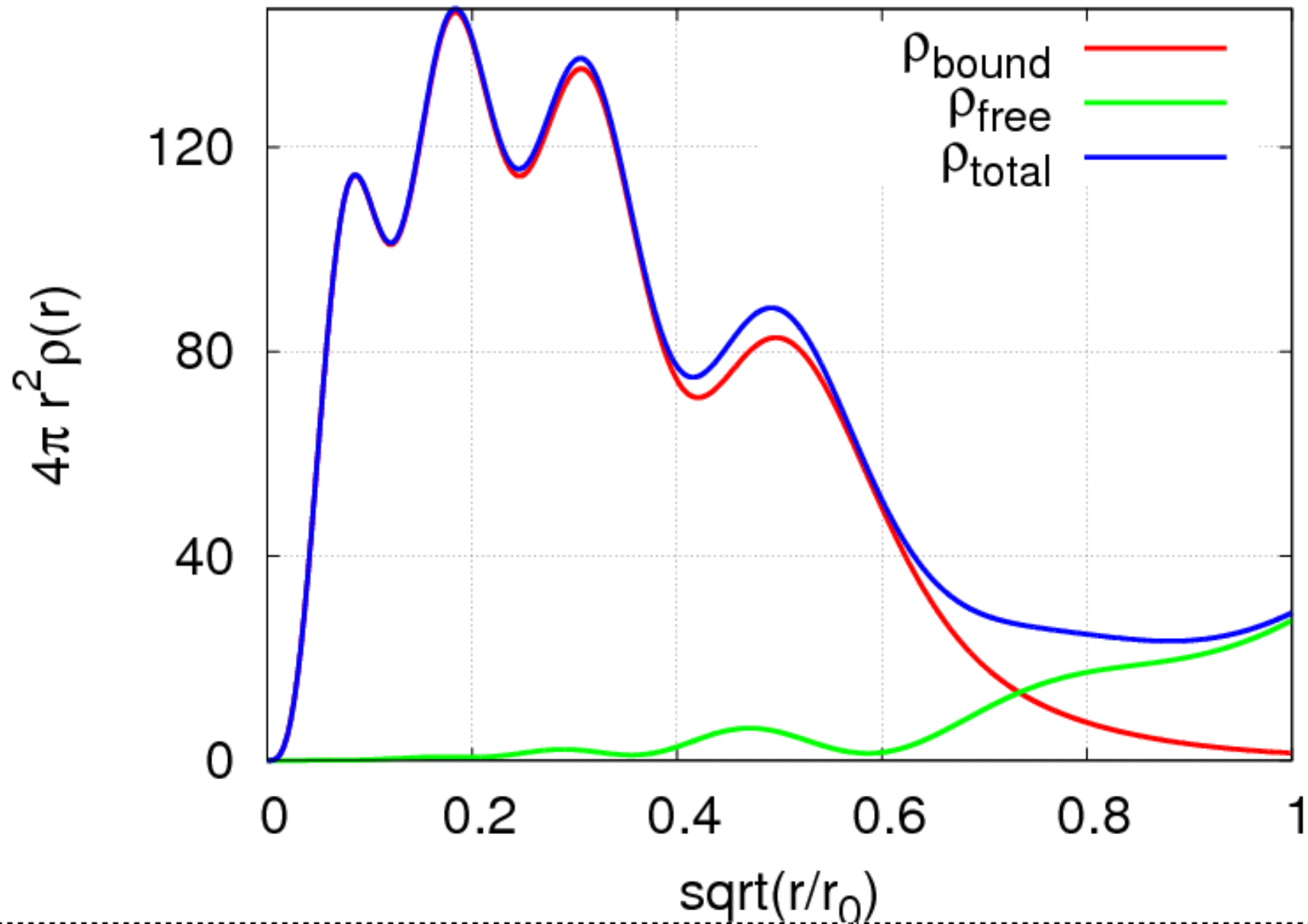
Au

T=50 эВ

7



Электронная плотность до ($\rho=145 \text{ г/см}^3$) и после ($\rho=146 \text{ г/см}^3$) выдавливания дискретного уровня $4f_{7/2}$ в непрерывный спектр



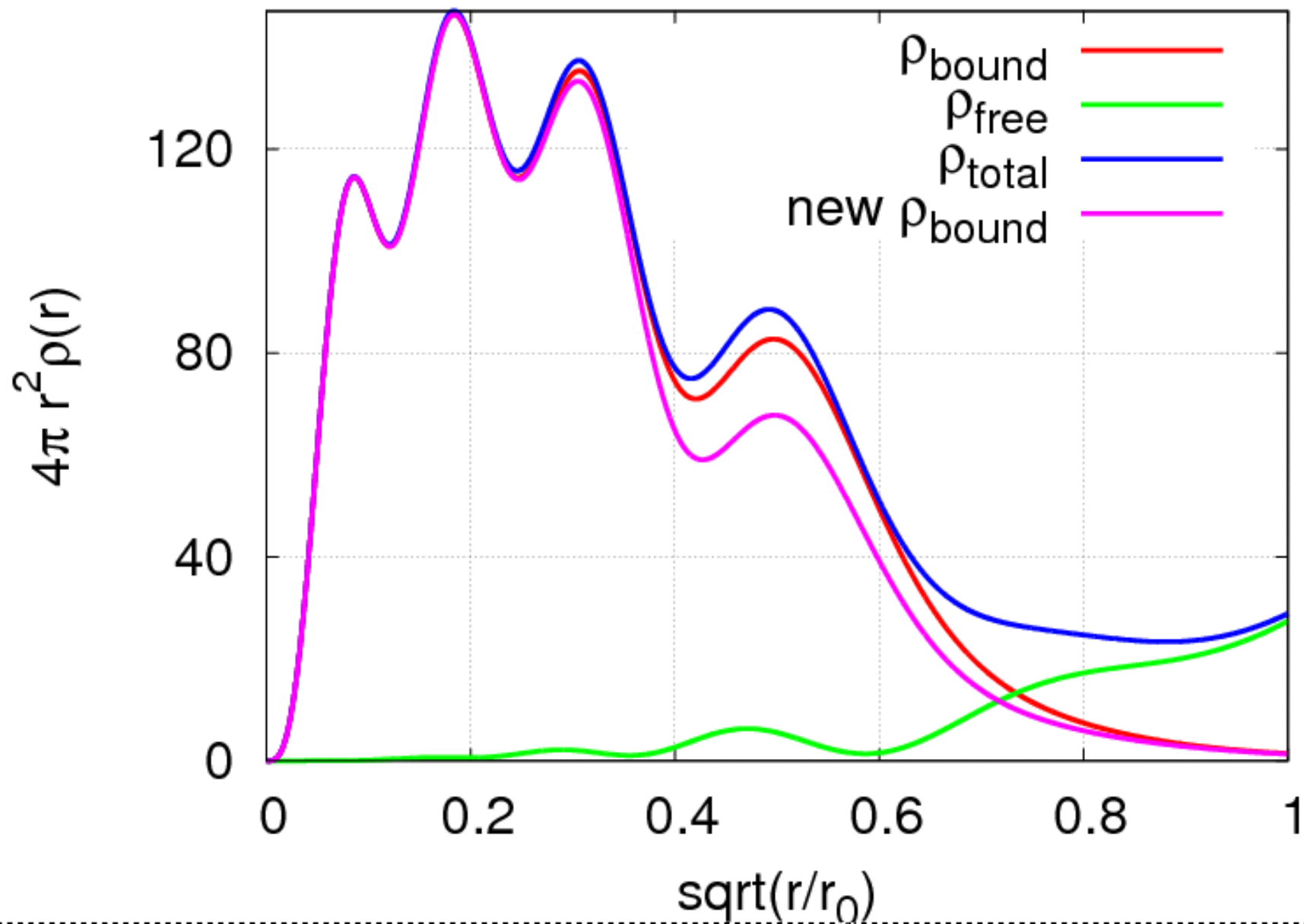
Au

T=50 эВ

8



Электронная плотность до ($\rho=145 \text{ г/см}^3$) и после ($\rho=146 \text{ г/см}^3$) выдавливания дискретного уровня $4f_{7/2}$ в непрерывный спектр



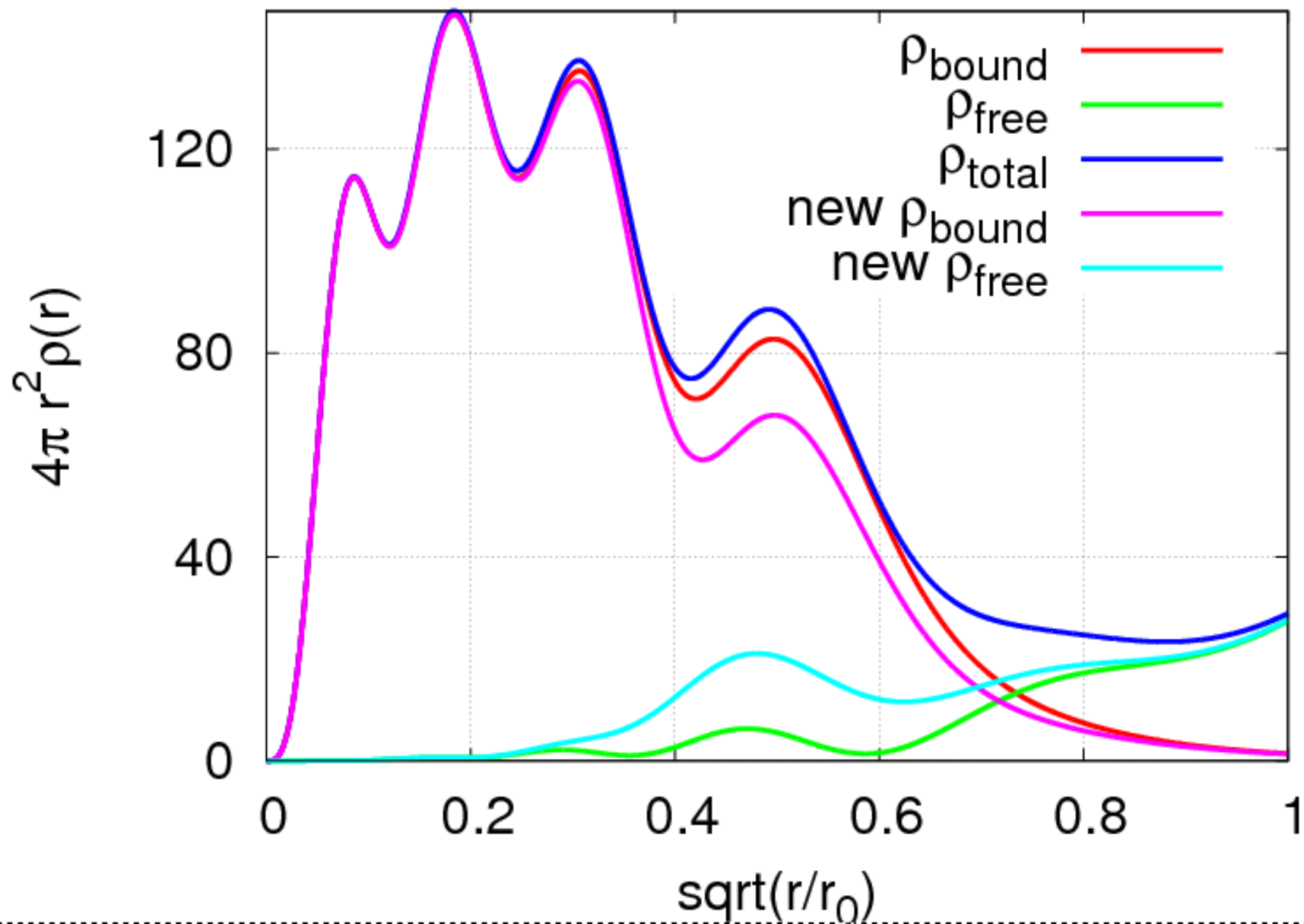
Au

T=50 эВ

9



Электронная плотность до ($\rho=145 \text{ г/см}^3$) и после ($\rho=146 \text{ г/см}^3$) выдавливания дискретного уровня $4f_{7/2}$ в непрерывный спектр

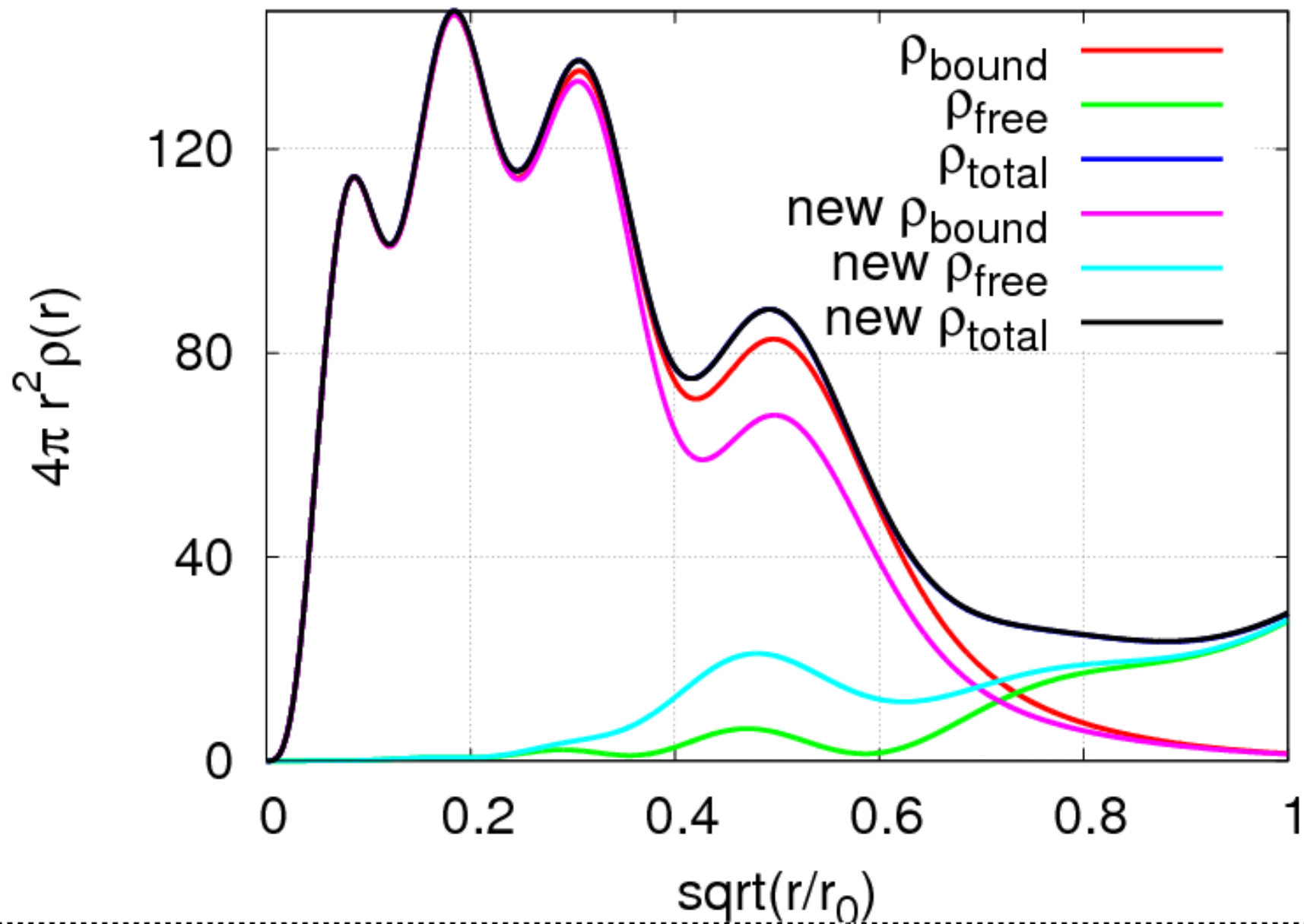


Au

T=50 эВ



Электронная плотность до ($\rho=145 \text{ г/см}^3$) и после ($\rho=146 \text{ г/см}^3$) выдавливания дискретного уровня $4f_{7/2}$ в непрерывный спектр

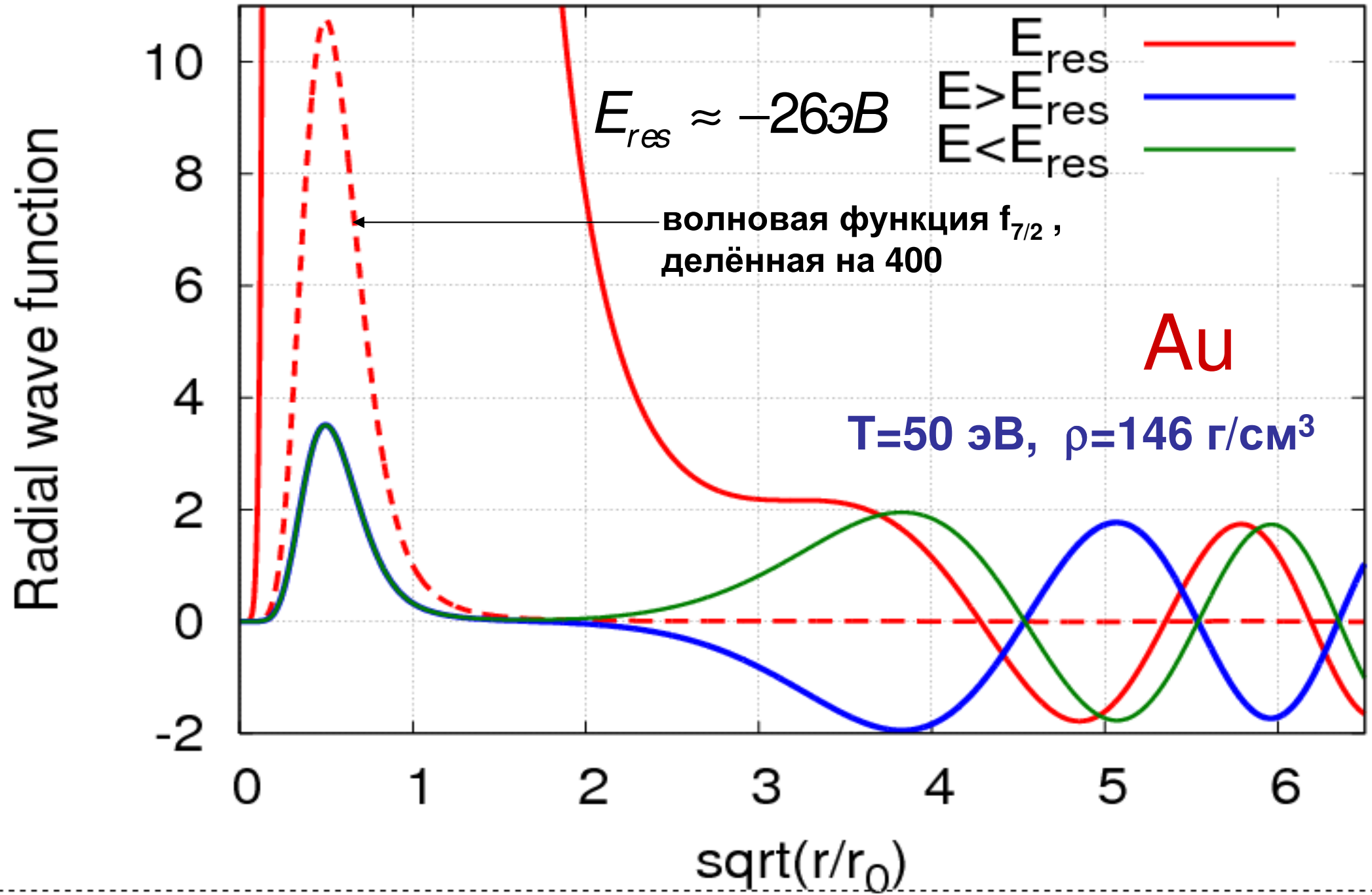


Au

T=50 эВ



Резонансная волновая функция $f_{7/2}$





Квазизонная модель

Волновая функция

$$\varepsilon = \varepsilon_{\nu}(k)$$

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

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

Периодические граничные условия

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

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

Воропинов А. И., Гандельман Г. М.,
Подвальный В. Г., УФН, 1970, 100,
с.193.

Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров
В.Б., ВАНТ, 1979, 4(6), с.16.

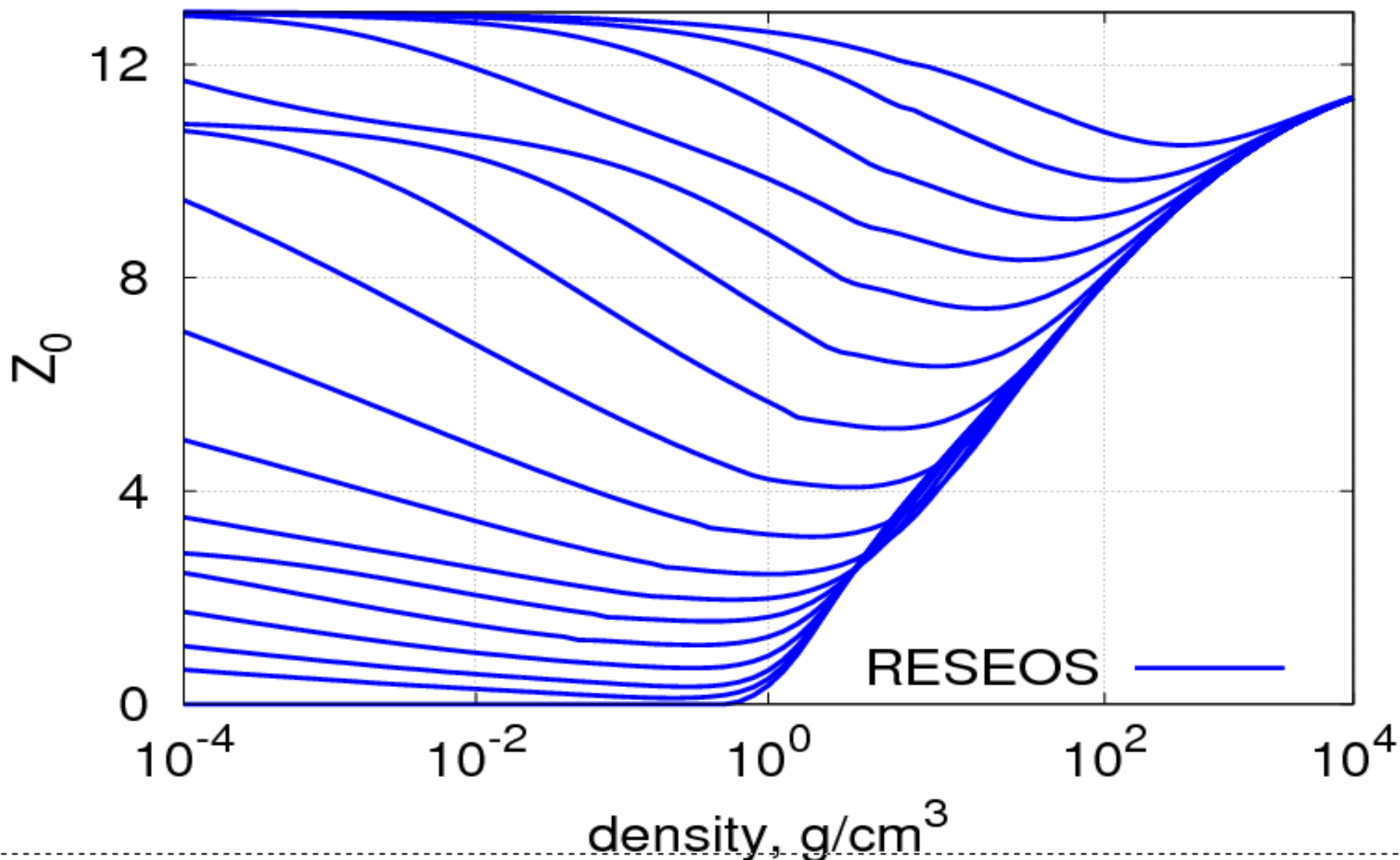


Написана программа для расчётов уравнения состояния по модели ограниченного атома в широком диапазоне температур и плотностей. Программа реализована как в однопроцессорном, так и в многопроцессорном вариантах.

Проведены расчёты уравнения состояния Al, U, H, W на суперкомпьютере РАН МВС100к. Среднее время счёта на персональном компьютере для одной точки по температуре и плотности ~ 0.5 часа.



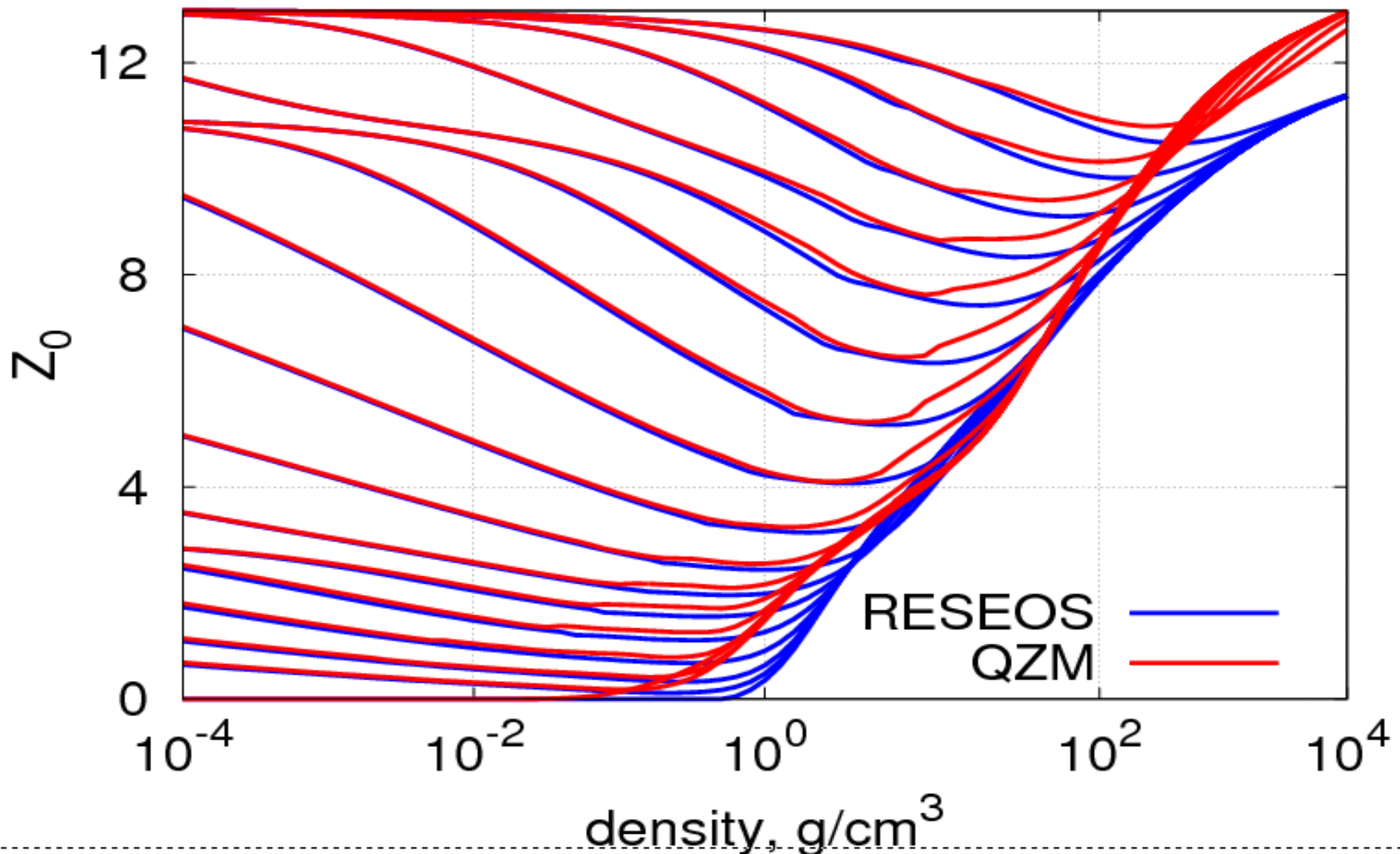
Средний заряд иона



AI

$T=0$; 1 эВ – 1 кэВ

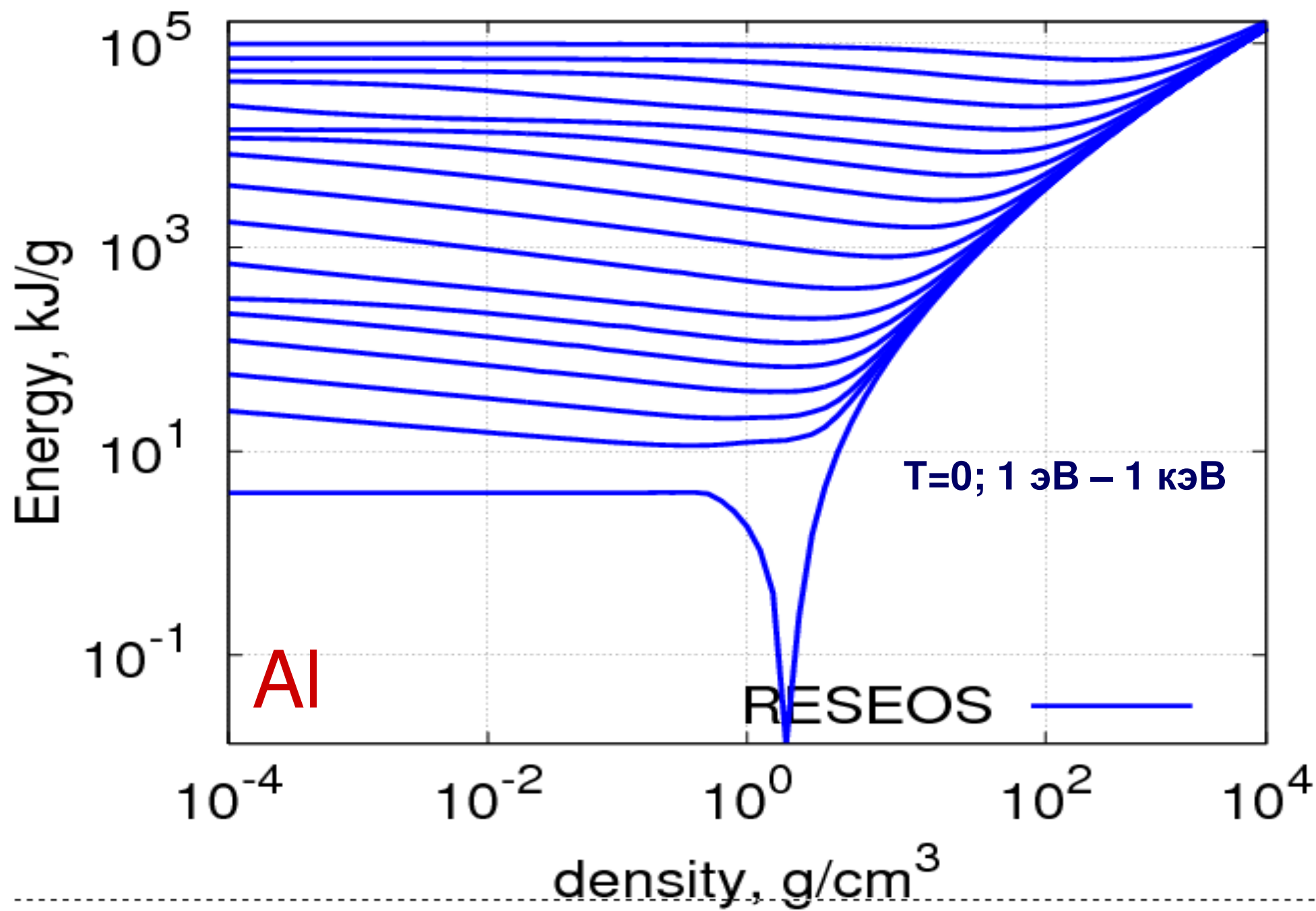
$$Z_0^{(\text{RESEOS})} = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \bar{\rho} \quad Z_0^{(\text{QZM})} = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho(r_0)$$

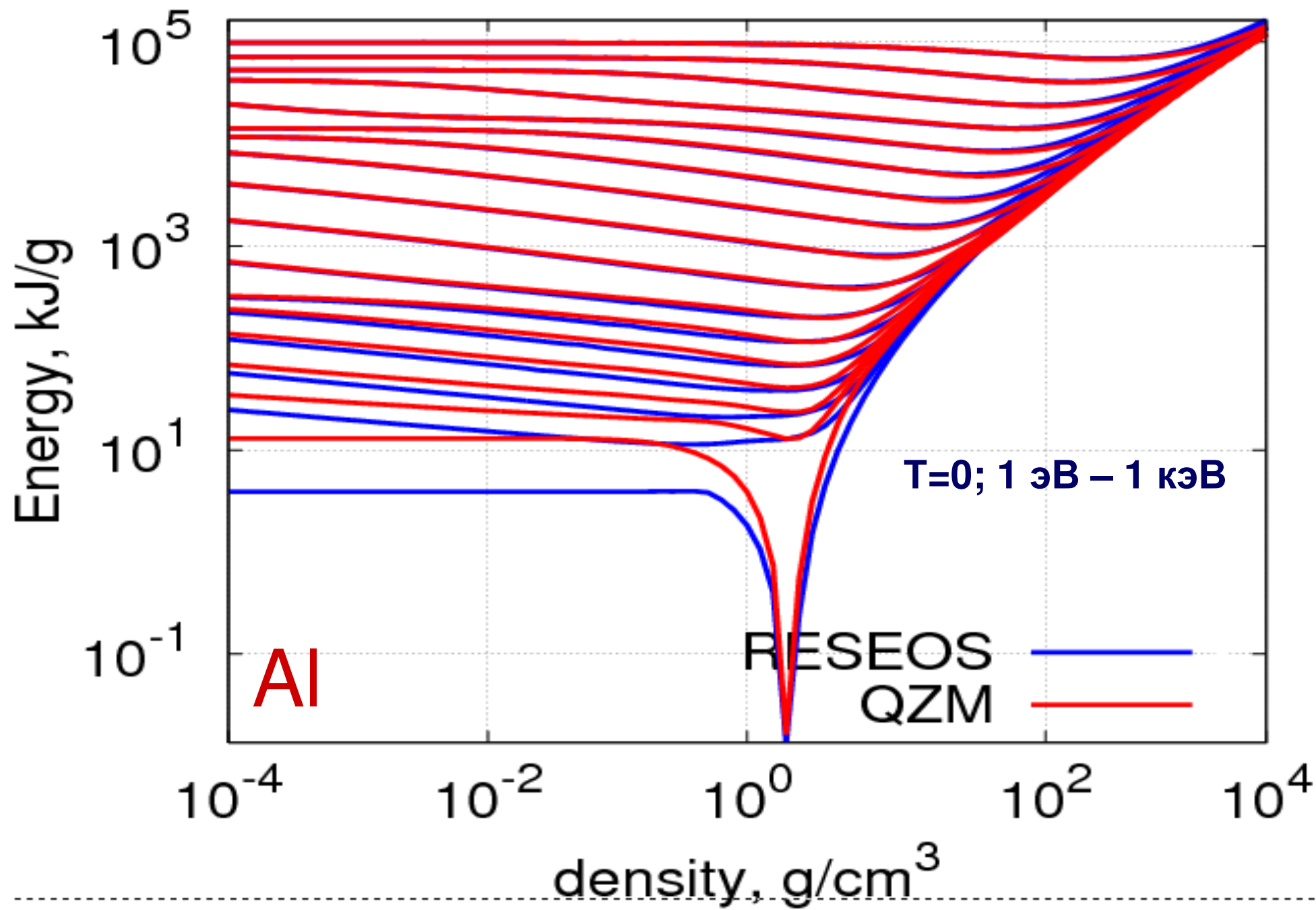


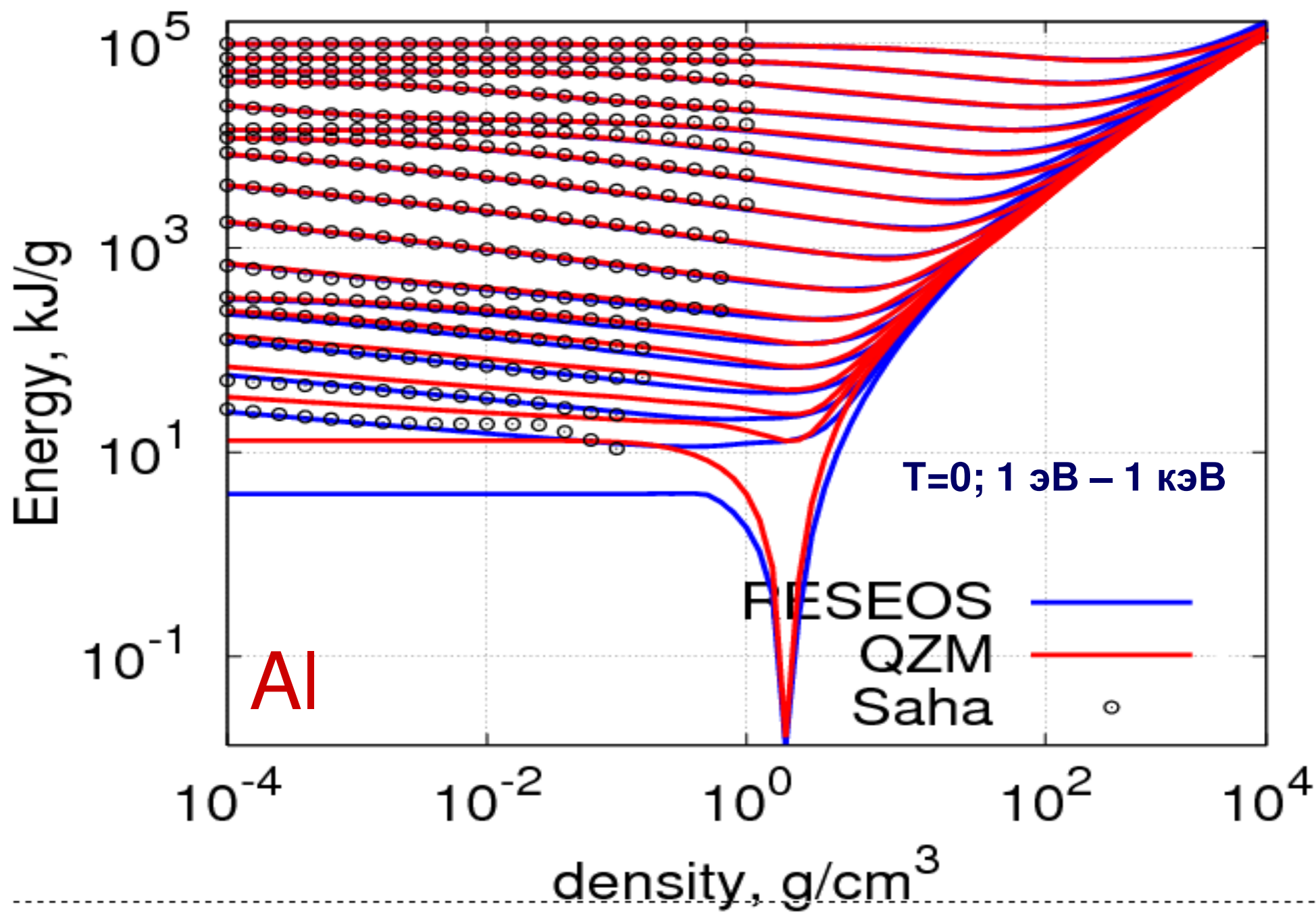
AI

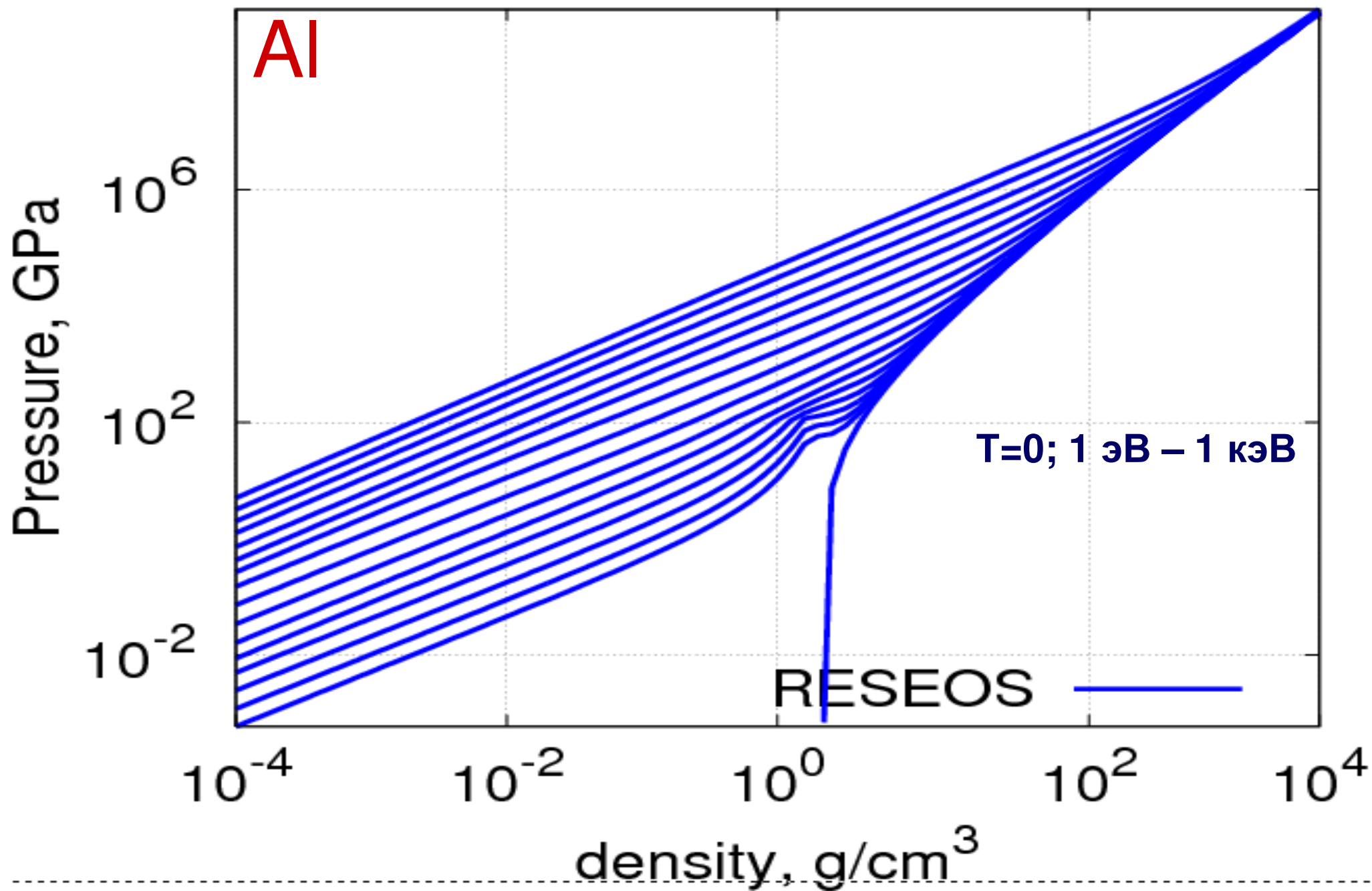
T=0; 1 эВ – 1 кэВ

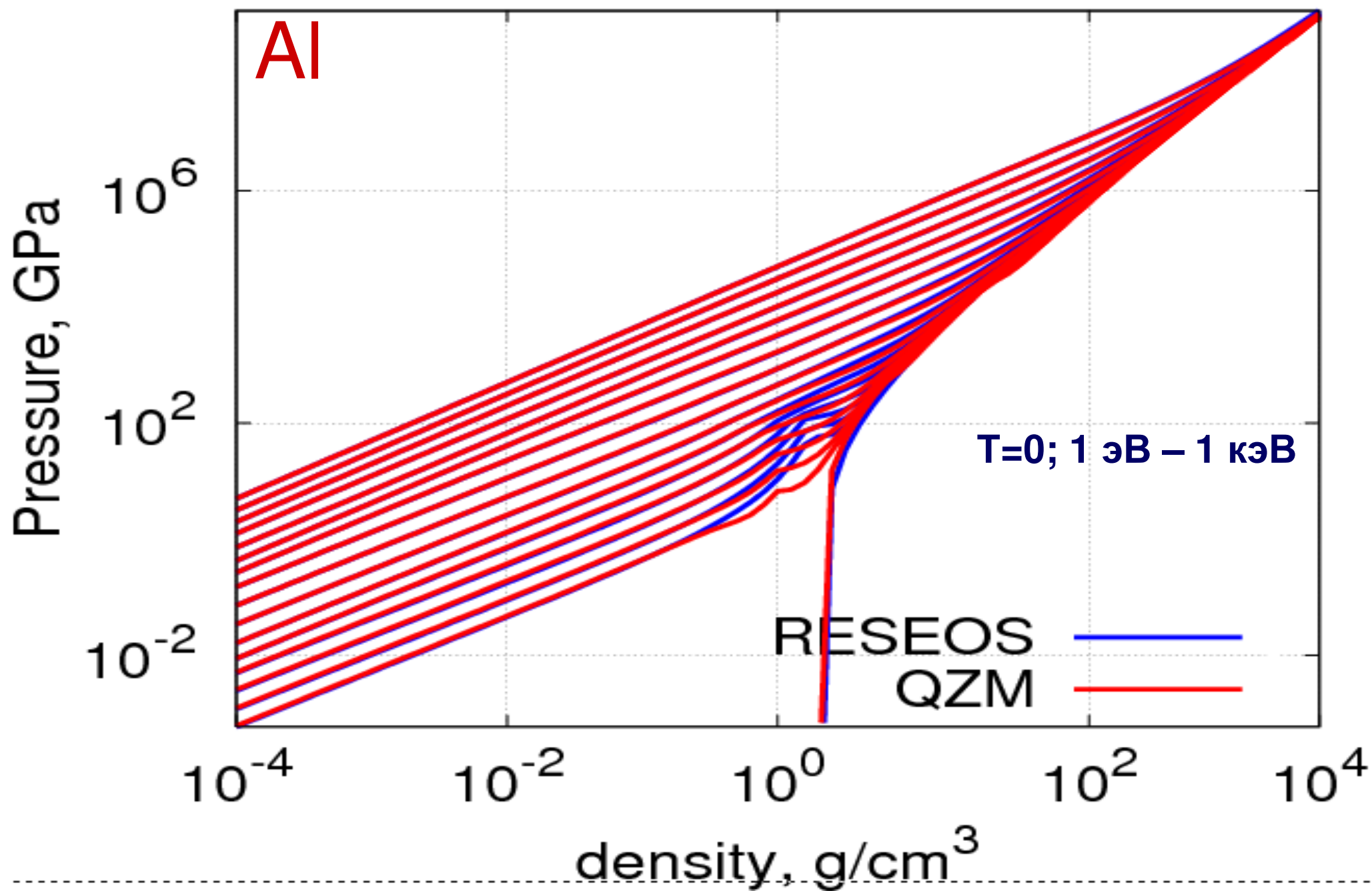
$$Z_0^{(RESEOS)} = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \bar{\rho} \quad Z_0^{(QZM)} = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho(r_0)$$

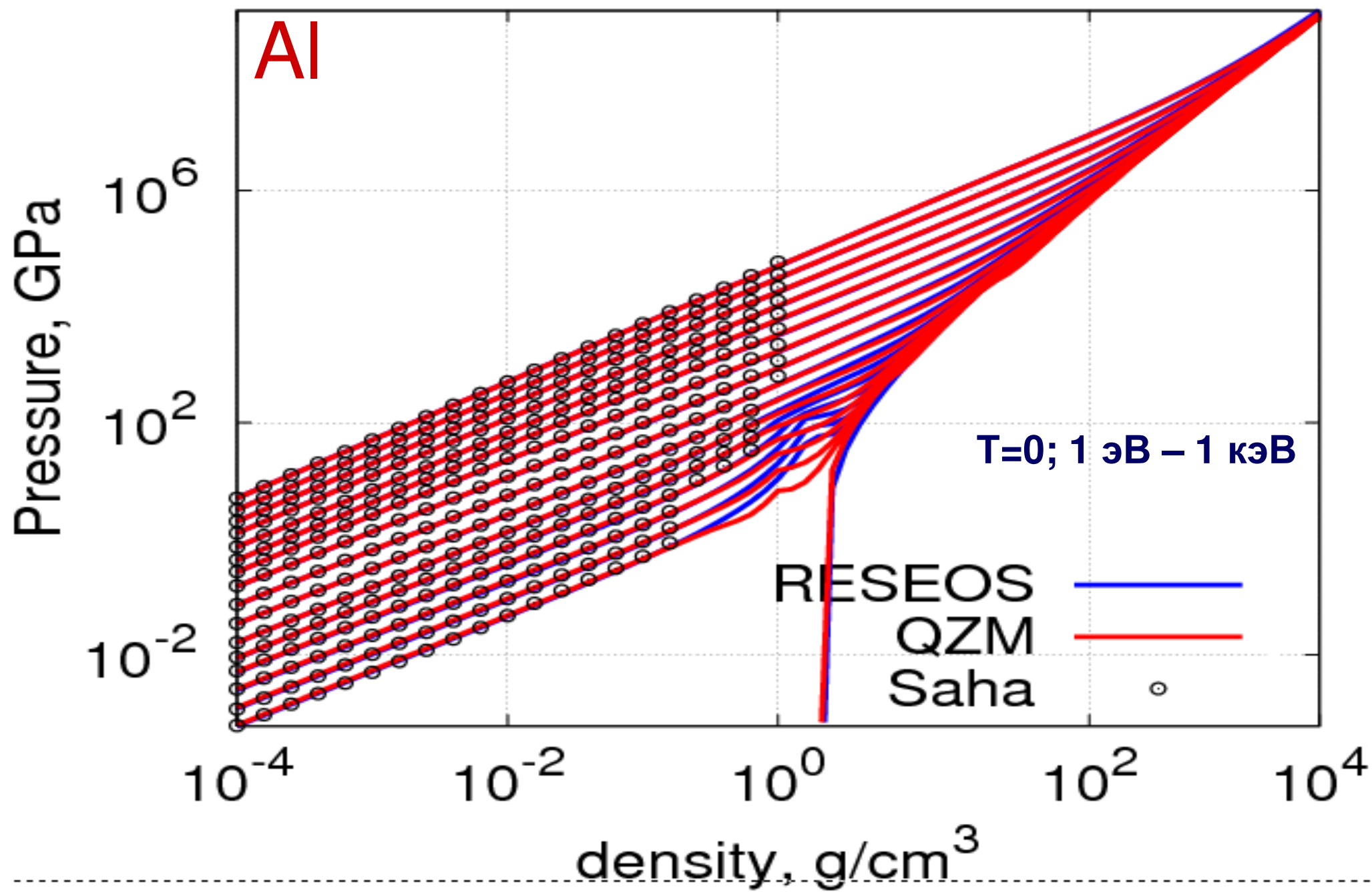






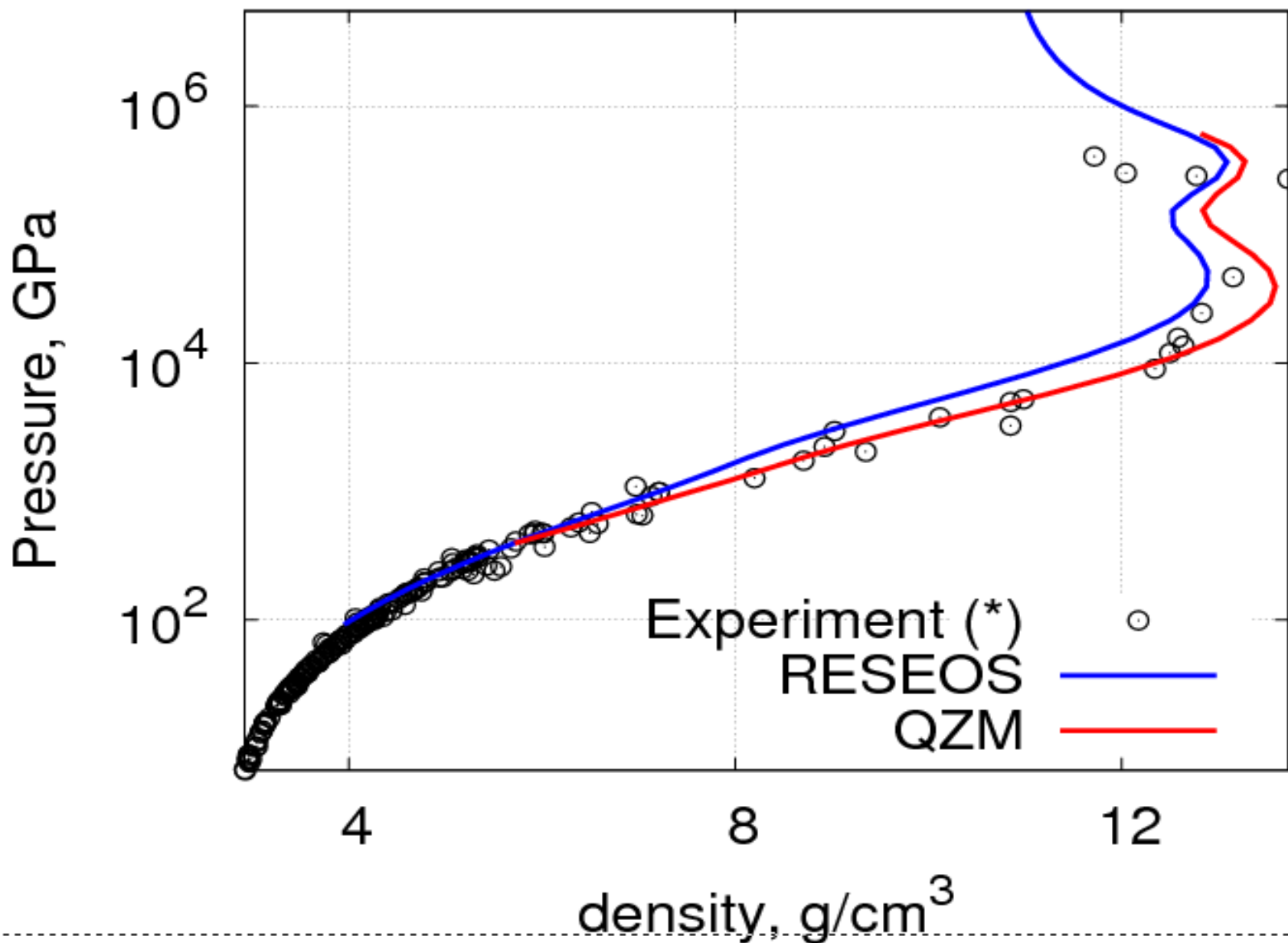






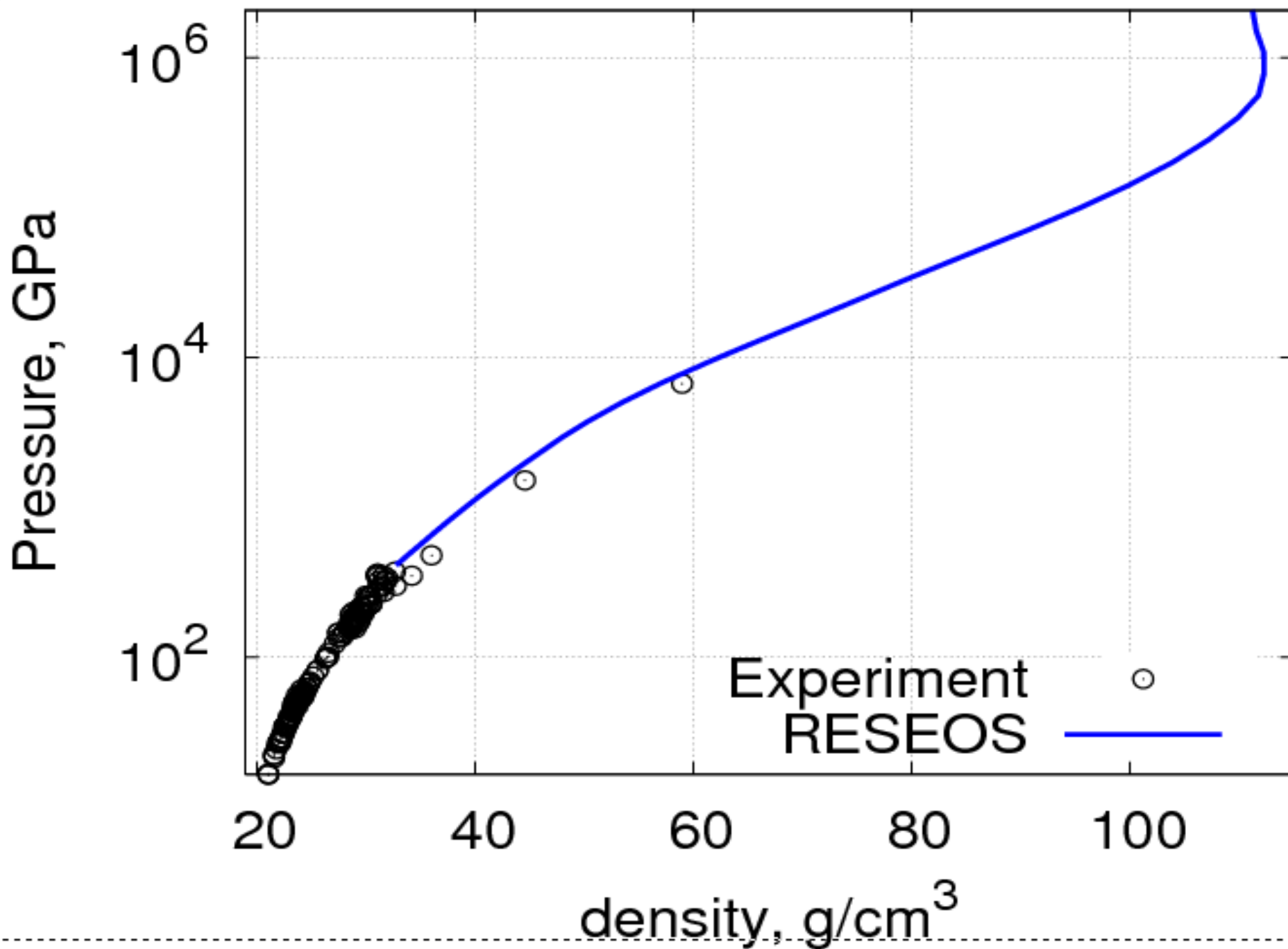


Ударная адиабата алюминия



Al

(*) Бушман А.В., Ломоносов И.В., Хищенко К.В. <http://teos.ficpr.ac.ru/rusbank/>
– база данных по ударному сжатию материалов и веществ





Заключение

-Модель ограниченного атома можно использовать для расчётов уравнения состояния в широком диапазоне температур и плотностей.

-В рамках модели ограниченного атома можно описать ионизацию давлением. При этом резонансы плотности состояний в непрерывном спектре играют такую же роль, как и энергетические зоны в квазизонной модели.

-Модель ограниченного атома даёт, как правило, меньшую степень ионизации и более жёсткие ударные адиабаты по сравнению с квазизонной моделью.

-Модель ограниченного атома по затратам машинного времени сопоставима с квазизонной моделью. Обе модели требуют параллельных вычислений.



Спасибо

за внимание!