

Ионно-корреляционная модель строения плотной плазмы:

структурные и термодинамические свойства тёплого
плотного вещества

Забабахинские научные чтения — 2017

Россия, Снежинск, 20 – 24 марта 2017 года

А. Л. Фальков^{1,2}, А. А. Овечкин¹ П. А. Лобода^{1,2}

1. Российский федеральный ядерный центр —
Всероссийский НИИ технической физики им. акад. Е. И. Забабахина,
456770, Российская Федерация, Снежинск, а/я 245

2. Национальный исследовательский ядерный университет— «МИФИ»,
115409, Российская Федерация, Москва, Каширское ш., д. 31

А. Л. Фальков



Введение

**Ионные
корреляции
Основные цели
исследования**

**Теория: ионные
корреляции**

Обзор моделей

**Метод
Старретта и
Саумона**

**Случай смесей
«Идеальный»
газ**

**Теория 2-ого
порядка**

**Результаты:
структура**

**РФР для
смесевой
плазмы**

**Результаты:
термодинамика**

**Изотермы
давления**

**Выводы и
перспективы**

- 1 Введение**
 - Ионные корреляции
 - Основные цели исследования
- 2 Теория: ионные корреляции**
 - Обзор моделей
- 3 Метод Старретта и Саумона**
 - Случай смесей
 - «Идеальный» газ
 - Теория 2-ого порядка
- 4 Результаты: структура**
 - РФР для смеси плазмы
- 5 Результаты: термодинамика**
 - Изотермы давления
- 6 Выводы и перспективы**

РФР — радиальные функции распределения,

ТПВ — тёплое плотное вещество



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции
Обзор моделей

Метод Старретта и Саумона

Случай смесей
«Идеальный» газ
Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смеси плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы



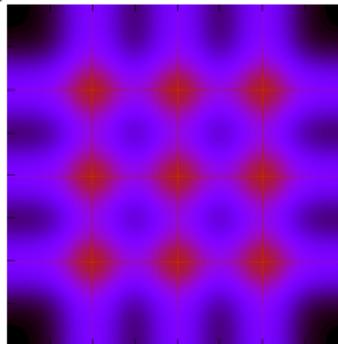
Ион-ионный кулоновский параметр неидеальности

$$\Gamma \sim \frac{E_{\text{Кул.}}}{E_{\text{кин.}}}, \quad \Gamma \equiv \frac{\bar{Z}^2 e^2}{r_0 T}, \quad r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n_I^0} \right)^{1/3}, \quad k_B = 1$$

\bar{Z} — средний заряд иона, $n_I^0 = N_A \rho / A$ — концентрация ионов

- $\Gamma \ll 1$ — газ идеальных ионов (Дебай);
- $1 \leq \Gamma \leq 150$ — режим тёплого и горячего плотного вещества (**WDM**);
- $\Gamma \geq 150 \div 220$ — фазовый переход («?») в состояние плазменного кулоновского ионного кристалла (Вигнер)

Пример:



2D динамическая плазменная фазовая пластинка для CO_2 лазера, 400 пс после облучения, углеродные микрониты с $T_e = T_i \sim 0,1$ кэВ

Введение

Ионные корреляции

Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

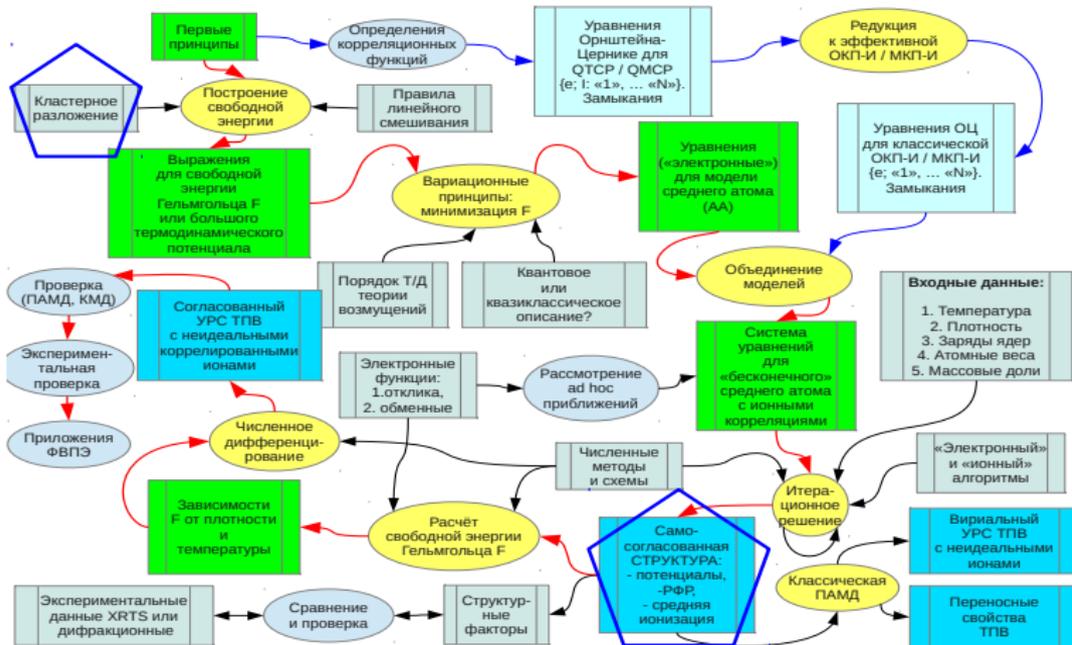
РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Получение УРС в моделях среднего атома с учётом ионных корреляций



Введение
Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции
Обзор моделей

Метод
Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ
Теория 2-ого порядка

Результаты: структура
RF для смесевой плазмы

Результаты: термодинамика
Изотермы давления

Выводы и перспективы

□ — утверждения и результаты, ○ — действия и преобразования,

$$dF = -SdT - pdV \Rightarrow p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T}, E = F + TS - \widetilde{E}_0 = F - T\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right)_{V} - \widetilde{E}_0$$

Свободная энергия

Описание корреляций ионов в различных моделях плазмы

- Томас-Ферми-Дирак, INFERNO, VAAQP $\Leftarrow g_{II}(r) = \Theta(r - r_0)$
- THERMOS, RESEOS \Leftarrow Феноменология — заряженные твёрдые сферы: эффекты исключённого объёма + ОКП взаимодействующих ионов (грубая поправка к давлению)
- Химические модели \Leftarrow Феноменология — твёрдые сферы: эффекты исключённого объёма + ОКП взаимодействующих ионов (согласованное описание посредством F)
- F. Perrot, Y. Rosenfeld \Leftarrow TF + $V_{II}^{eff}[r, g_{II}, V_{tot}[g_{II}]]$ + уравнения Орнштейна-Цернике (ОЦ) для РФР $g_{II}(r)$

$$\Downarrow V_{el}[g_{II}] \Rightarrow n_e[V_{el}] \Rightarrow V_{II}[n_e, c_{Ie}, c_{ee}, \dots] \Rightarrow g_{II}(r) \circlearrowright$$

- QHNC \Leftrightarrow Средний атом \cup Модель (e-I) TCP \cup «желе»
- Б. Ф. Рожнаи $\Leftarrow c_{Ie}, c_{II}$ — «чистое» кулоновское взаимодействие без ЛПК (локально-полевой коррекции) + g_{II} — из системы уравнений ОЦ
- TFSC, QMSC (Ч. Е. Старретт и Д. Саумон) $\Leftarrow c_{Ie}, c_{II}$ — с ЛПК + g_{II} — из системы уравнений ОЦ с гипцепным приближением (ГПЦ)

...

Система уравнений ОЦ — J.-P. Hansen, I. R. McDonald. Theory of Simple Liquids. — N.-Y., «Acad. Press» (2006).

Замыкание ГПЦ — J. M. J. van Leeuwen, J. Groeneveld, J. de Boer. Physica 25, 792 (1959).



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Модель Старретта и Саумона: обобщение на случай смесей

($\beta_e = \beta_i = \beta = 1/T$; $i = \overline{1, N}$, N — число различных сортов ионов)

$$\boxed{A_{\kappa_1}^{(1)} A_{\kappa_2}^{(2)} \dots A_{\kappa_N}^{(N)}} \Rightarrow \omega_i = \frac{\kappa_i A^{(i)}}{\sum_{j=1}^N \kappa_j A^{(j)}}, \quad x_i = \frac{\kappa_i}{\sum_{j=1}^N \kappa_j}, \quad \begin{cases} \sum_{i=1}^N \omega_i = 1, \\ \sum_{i=1}^N x_i = 1. \end{cases}$$

$$\boxed{F_{tot} = \sum_{i=1}^N \omega_i F_i = \sum_{i=1}^N \omega_i (F_i^{id} + F_i^{el} + F_i^{xc}),}$$

$$\begin{cases} \lim_{r \rightarrow \infty} n_{e_i}(\mathbf{r}) = n_e^0 = \mathbf{invar} \Rightarrow \Delta n_{e_i}(\mathbf{r}) = n_{e_i}(\mathbf{r}) - n_e^0, \\ \lim_{r \rightarrow \infty} n_i(\mathbf{r}) = n_i^0 \Rightarrow \Delta n_i(\mathbf{r}) = n_i(\mathbf{r}) - n_i^0 \left(\overline{n_i^0} \equiv \omega_i n_{tot} \neq n_i^0 \right). \end{cases}$$

$$F_i = \mathcal{F}_i + F_i^C = \mathcal{F}_i + \int_{V_\infty} d\mathbf{r} (V_{N_i e_i}^C(\mathbf{r}) \Delta n_{e_i}(\mathbf{r}) + V_{N_i i}^C(\mathbf{r}) \Delta n_i(\mathbf{r})).$$

$$\mathcal{F}_i = F_i^{id} + \mathcal{F}_i^{ex} = F_{e_i}^{id} + F_{I_i}^{id} + \mathcal{F}_i^{ex},$$

$$F_i^{el} + F_i^{xc} = \mathcal{F}_i^{ex} + F_i^C = \mathcal{F}_i^{ex} - Z_i \int_{V_\infty} \frac{d\mathbf{r}}{r} \underbrace{(\Delta n_{e_i}(\mathbf{r}) - Z_i^* \Delta n_i(\mathbf{r}))}_{\equiv N_{I e_i}(\mathbf{r})}.$$

Введение

Ионные
корреляции
Основные цели
исследования

Теория: ионные
корреляции

Обзор моделей

Метод
Старретта и
Саумона

Случай смесей
«Идеальный»
газ

Теория 2-ого
порядка

Результаты:
структура

РФР для
смесевой
плазмы

Результаты:
термодинамика

Изотермы
давления

Выводы и
перспективы

Выражения для свободной энергии Гельмгольца

Общая схема. «Идеальногазовые» вклады

$$F_i = \underbrace{\left(F_{I_i}^{id} + F_{e_i}^{id} \right)}_{F_i^{id}} + \underbrace{\left(F_{0_i}^{el} + \Delta F_i^{el} \right)}_{F_i^{el}} + \underbrace{\left(F_{0_i}^{xc} + \Delta F_{ie_i}^{xc} + \Delta F_{ii}^{xc} + \Delta F_{e_i e_i}^{xc} \right)}_{F_i^{xc}}$$

Кластерное разложение для «идеальногазовых» «l» и «e» вкладов:

$$F_{I_i}^{id} = \frac{1}{\beta} \ln \left| \frac{n_i^0 \Lambda_i^3}{e} \right| + \frac{n_i^0}{\beta} \int_{V_{\infty}} dr \left(g_{ii}(r) \ln \left| \frac{n_i^0 g_{ii}(r) \Lambda_i^3}{e} \right| - \ln \left| \frac{n_i^0 \Lambda_i^3}{e} \right| \right),$$

$$F_{e_i}^{id} = \frac{1}{n_I^0} \left[n_e^0 \mu_{e_i}^{id} - \frac{2}{3\beta} C_{TF} I_{3/2} \left[\beta \mu_{e_i}^{id} \right] \right] +$$

$$+ \int_{V_{\infty}} dr \left[n_{e_i}(r) \frac{\Phi_i(r)}{\beta} - \frac{2}{3\beta} C_{TF} \left(I_{3/2} [\Phi_i(r)] - I_{3/2} \left[\beta \mu_{e_i}^{id} \right] \right) - n_e^0 \mu_{e_i}^{id} \right],$$

$$C_{TF} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2 \beta^{3/2}}; \Phi_i(r) = \beta \left[\mu_{e_i}^{id} - V_{N_i e_i}^{eff}(r) \right], n_{e_i}(r) = C_{TF} I_{1/2} [\Phi_i(r)].$$

↑ Коррелированные $\{e_i, i\}$ «газы» (невзаимодействующие частицы)

$\Lambda = \text{const}$ — ионная длина волны де Бройля, $C_{TF} = \text{const}$.

Кластерное разложение — Т. Blenski, В. Chichoki. Phys. Rev. E 75, 0056402 (2007).

Ионный вклад (без кластерного разложения) F_I^{id} — J.-P. Hansen, I. R. McDonald. Theory of Simple Liquids. — N.-Y., «Acad. Press» (2006).

Электронный вклад (без кластерного разложения) F_e^{id} — J. Cl rouin, E. L. Polloc, G. Zerah. Phys. Rev B 46, 5130 (1992).



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод Старретта и Саумона

Случай смесей

«Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Выражения для свободной энергии Гельмгольца

Корреляционная теория второго порядка

$$\Delta \mathcal{F}_i^{ex} = \mathcal{F}_i^{ex} - (\mathcal{F}_i^{ex})^0 = \mathcal{F}_i^{ex} - \frac{f_i^0}{n_i^0} = \sum_{p=1}^S \frac{1}{p!} \sum_{\alpha_1=1}^2 \dots \sum_{\alpha_p=1}^2 \int_{V_\infty} d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_p \times$$

$$\times \left(\frac{\delta^p \mathcal{F}_i^{ex}}{\delta \Delta n_{\alpha_1}(\mathbf{r}_1) \dots \delta \Delta n_{\alpha_p}(\mathbf{r}_p)} \right)_{|0_{\alpha_1} \dots 0_{\alpha_p}} \prod_{t'=1}^p \Delta n_{\alpha_{t'}}(\mathbf{r}_{t'}),$$

$$0_{\alpha_p} \Leftrightarrow V_{N_i \alpha_p}^C(r) = \frac{1}{r} \begin{cases} Z_i Z_i^*, & \alpha_p = 1, \\ -Z_i, & \alpha_p = 2 \end{cases} \rightarrow 0.$$

$$S \equiv 2 \Rightarrow \Delta \mathcal{F}_i^{ex} = \sum_{\alpha=1}^2 \int_{V_\infty} d\mathbf{r} \underbrace{\left(\frac{\delta \mathcal{F}_i^{ex}}{\delta \Delta n_\alpha(\mathbf{r})} \right)_{|0_\alpha}}_{\equiv \mu_\alpha^{ex}} \Delta n_\alpha(\mathbf{r}) +$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\beta=1}^2 \int_{V_\infty} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \underbrace{\left(\frac{\delta^2 \mathcal{F}_i^{ex}}{\delta \Delta n_\alpha(\mathbf{r}) \delta \Delta n_\beta(\mathbf{r}')} \right)_{|0_\alpha 0_\beta}}_{\equiv -c_{\alpha\beta}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)/\beta} \Delta n_\alpha(\mathbf{r}) \Delta n_\beta(\mathbf{r}').$$

$$c_{\alpha\beta}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \widetilde{c}_{\alpha\beta}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) - \beta V_{\alpha\beta}^C(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|).$$

Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Обменный и корреляционный вклады в свободную энергию

$$F_i^{xc} = F_{0i}^{xc} + \Delta F_{ii}^{xc} + \Delta F_{ie_i}^{xc} + \Delta F_{e_i e_i}^{xc}$$

$$\Delta F_{ii}^{xc} = \frac{-1}{2\beta} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \widetilde{c}_{ii} [(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), n_e^0] \Delta n_i(r) \Delta n_i(r'),$$

$$\Delta F_{ie_i}^{xc} = \frac{-1}{\beta} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \widetilde{c}_{e_i i} [(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), n_e^0] (\Delta n_{e_i}(r) - n_{e_i}^{ion}(r)) \Delta n_i(r'),$$

$$\Delta F_{e_i e_i}^{xc} = \frac{-1}{2\beta} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \widetilde{c}_{e_i e_i} [(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), n_e^0] \Delta n_{e_i}(r) \Delta n_{e_i}(r').$$

В текущем варианте модели используется кластерное разложение для электронного обменного вклада:

$$\begin{aligned} & (F_i^{xc})^0 + \Delta F_{e_i e_i}^{xc} = \\ & = \frac{-3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \left[\frac{(n_e^0)^{4/3}}{n_i^0} - \int_{V_\infty} d\mathbf{r} \left(n_{e_i}^{4/3}(r) - (n_e^0)^{4/3} \right) \right]. \end{aligned}$$

Введение

Ионные
корреляции
Основные цели
исследования

Теория: ионные
корреляции
Обзор моделей

Метод
Старретта и
Саумона

Случай смесей
«Идеальный»
газ

Теория 2-ого
порядка

Результаты:
структура

РФР для
смесевой
плазмы

Результаты:
термодинамика

Изотермы
давления

Выводы и
перспективы

Электростатический вклад в свободную энергию

РФЯЦ-ВНИИТФ $\rightarrow F_i^{el}$ — из разложения в ряд Тэйлора:

$$F_i^{el} = F_{0i}^{el} + \Delta F_i^{el}, \quad F_{0i}^{el} = \mu_{e_i}^{ex} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} \Delta n_{e_i}(r) + \mu_i^{ex} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} \Delta n_i(r),$$

$$\Delta F_i^{el} = -Z_i \int_{V_\infty} d\mathbf{r} \frac{\mathcal{N}_{Ie_i}(r)}{r} + \frac{1}{2} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\mathcal{N}_{Ie_i}(r) \mathcal{N}_{Ie_i}(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|},$$

$$\mathcal{N}_{Ie_i}(r) \equiv \Delta n_{e_i}(r) - n_e^0 \Delta n_i(r) / n_i^0.$$

ЛАНЛ $\rightarrow F_i^{el}$ — из усреднения сумм по ионной псевдорешётке:

$$F_i^{el} = \left(F_{NS}^{el}\right)_i + \langle F_S^{el} \rangle_i, \quad \left(F_{NS}^{el}\right)_i = \frac{1}{2} \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_{e_i}^{PA}(r) \left[\frac{-Z_i}{r} + V_i^{PA}(r) \right],$$

$$n_{e_i}^{PA}(r) \equiv n_{e_i}(r) - n_{e_i}^{ion}(r), \quad V_i^{PA}(r) \equiv \frac{-Z_i}{r} + \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' \frac{n_{e_i}^{PA}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$$

$$\langle F_S^{el} \rangle_i = \frac{1}{2} \left[-Z_i V_{Ne_i}^{ext}(r=0) + \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_{e_i}^{PA}(r) V_{Ne_i}^{ext}(r) \right],$$

$$V_{Ne_i}^{ext}(r) = n_i^0 \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' g_{ii}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) V_i^{PA}(r').$$



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

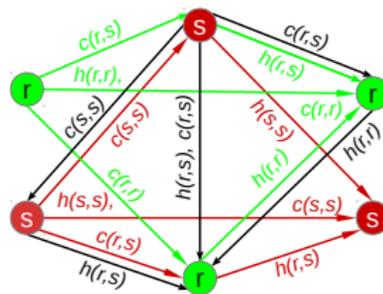
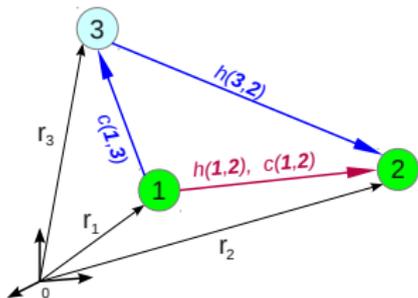
РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Однокомпонентная система: Двухкомпонентная система:



$$(1) \rightarrow h(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) + n_I^0 \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' h(\mathbf{r}') c(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$$

$$(2) \rightarrow h_{rs}(\mathbf{r}) = c_{rs}(\mathbf{r}) + n_s^0 \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' h_{rs}(\mathbf{r}') c_{ss}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) +$$

$$+ n_r^0 \int_{V_\infty} d\mathbf{r}' h_{rr}(\mathbf{r}') c_{rs}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$$

c — прямая парная корреляционная функция;

h — полная парная корреляционная функция.



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей
«Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Матричная форма уравнений ОЦ для классических ионов:

$$\widehat{h}(k) = \widehat{c}(k) + \widehat{c}(k) \widehat{D} \widehat{h}(k), \quad D_{ij} = \delta_{ij} \overline{n_j^0}, \quad \begin{cases} \widehat{h}(k) = \{h_{ij}\}_{i,j=1}^N : \widehat{h} = \widehat{h}^T, \\ \widehat{c}(k) = \{c_{ij}\}_{i,j=1}^N : \widehat{c} = \widehat{c}^T. \end{cases}$$

Набор уравнений-замыканий для системы ОЦ:

$$h_{ij}(r) + 1 = \exp(-\beta V_{ij}(r) + h_{ij}(r) - c_{ij}(r) + E_{ij}(r)), \quad i, j \leq N,$$

«Рецепт» для эффективных ион-ионных потенциалов:

$$V_{ij}(k) = 4\pi \frac{\overline{Z_i} \cdot \overline{Z_j}}{k^2} - \frac{c_{eii}(k)}{\beta} n_{e_j}^{\text{scr}}(k), \quad c_{eii}(k) = -\beta n_{e_i}^{\text{scr}}(k) / \chi'_{ee}(k),$$

$$\overline{Z_i} = \int_{V_\infty} dr n_{e_i}^{\text{scr}}(r), \quad \chi'_{ee}(k) = \frac{\chi_{ee}^0(k)}{1 + \chi_{ee}^0(k) c_{ee}(k) / \beta},$$

$$n_{e_i}^{\text{scr}}(r) = n_{e_i}^{\text{PA}}(r) - n_{e_i}^{\text{ion}}(r) = n_{e_i}(r) - n_{e_i}^{\text{ext}}(r) - n_{e_i}^{\text{ion}}(r).$$



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешанной плазмы

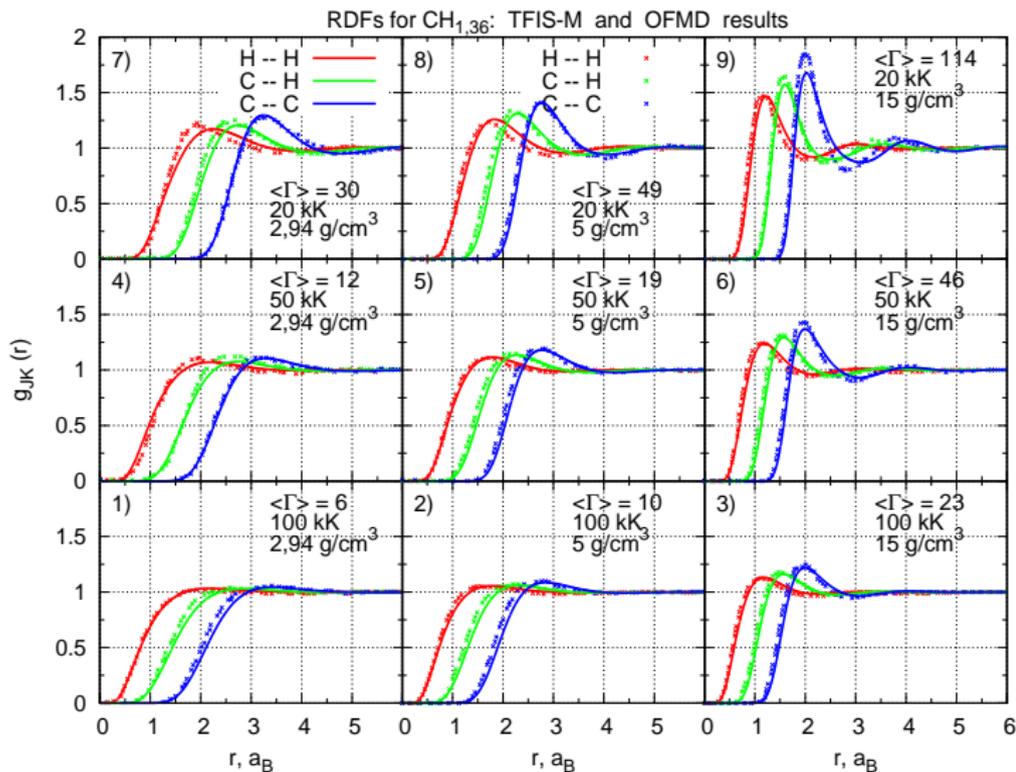
Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Парциальные ионные РФР для плазмы $\text{CH}_{1,36}$

А. Л. Фальков



TFIS-M vs OFMD. E_D : $T_{H-H} \sim 20 \text{ kK}$, $T_{C-H} \sim T_{C-C} \sim 50 \text{ kK}$

× — OFMD данные: C. E. Starrett, D. Saumon et al. Phys. Rev. E 90, 033110 (2014).

Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей
«Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешевой плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

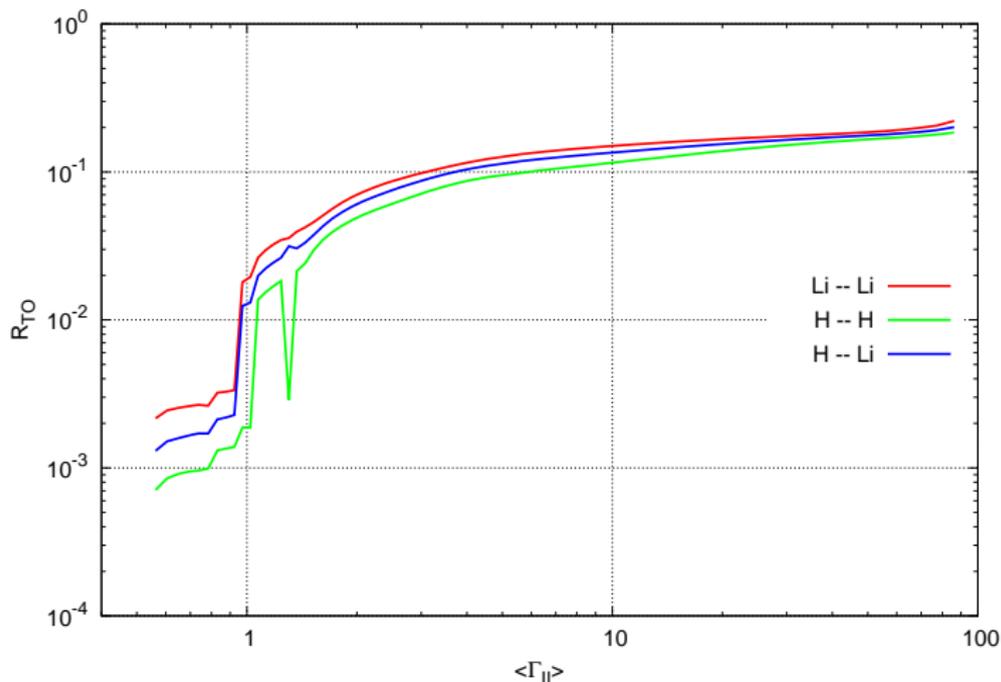
РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

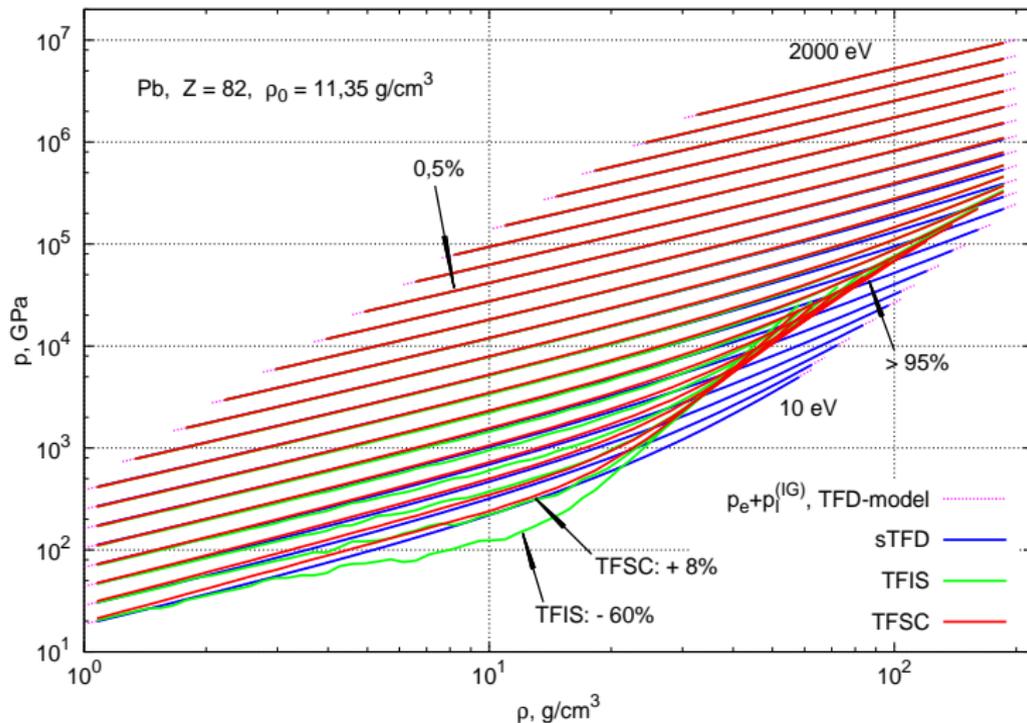
Выводы и перспективы **R_{TO} — изохоры параметра трансляционного порядка**

Замечание о границах применимости методики. Li^7H , $\rho = 0,78 \text{ г/см}^3$



$$R_{TO}^{(i,j)} = \frac{1}{r_{\max}^{(i,j)}} \int_0^{r_{\max}^{(i,j)}} dr (g_{ij}(r) - 1)$$

Вопрос пересечения изотерм полного давления, рассчитанных в рамках модели, учитывающей ионные корреляции



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешевой плазмы

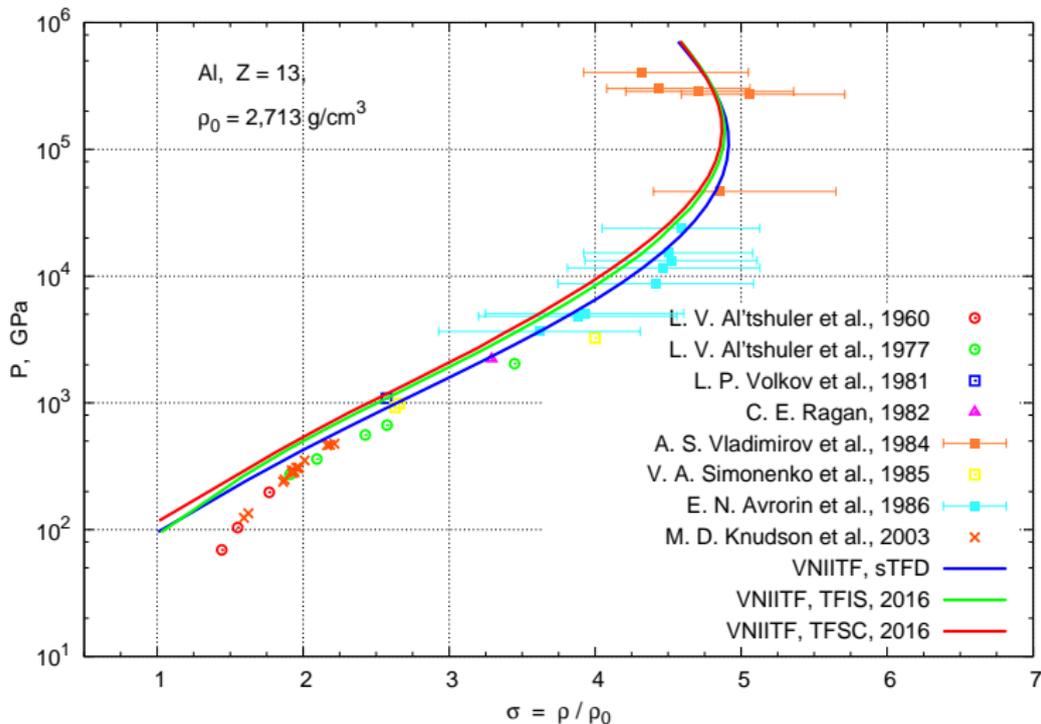
Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

sTFD vs TFIS/TFSC (модели с ионными корреляциями)

Главная ударная адиабата алюминия



А. Л. Фальков



Введение

Ионные корреляции
Основые цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей
«Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешевой плазмы

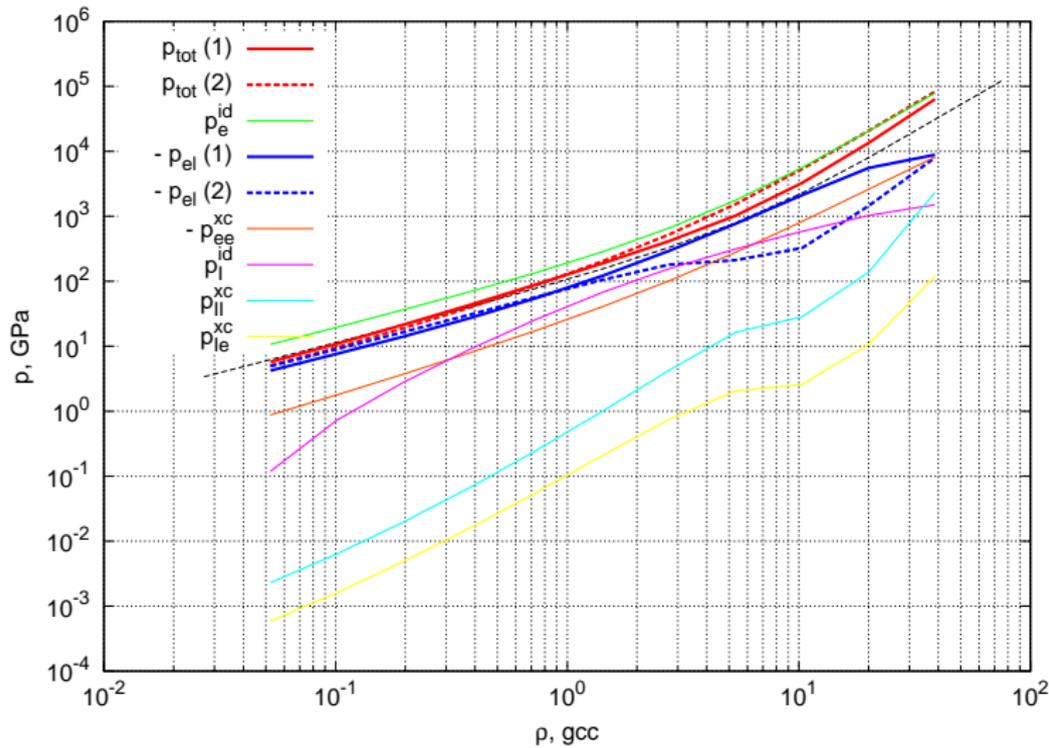
Результаты: термодинамика

Изоотермы давления

Выводы и перспективы

Составляющие полного давления. Al, изотерма 5 эВ

А. Л. Фальков



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод

Старретта и Саумона

Случай смесей
«Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смешанной плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Выводы. Основные результаты

Микроструктура вещества и термодинамические функции

- 1 РФР для тёплого и горячего плотного простого вещества, рассчитанные с использованием кода TFSC/QMIS «Элегия», в котором реализованы квазиклассическая и квантовая версии модели среднего атома Старретта и Саумона с ионными корреляциями, хорошо согласуются с результатами первопринципного МД моделирования.
- 2 Использование первого приближения квазиклассического варианта модели TFIS-M для описания ионных корреляций позволяет уверенно воспроизводить парциальные РФР в смесевом ТПВ вплоть до значений $\langle \Gamma \rangle \sim 10^3$.
- 3 Достигнута возможность реалистичного учёта ионного беспорядка и корреляций при расчёте УРС в «бесконечном» варианте квазиклассической модели среднего атома.
- 4 Включение в рассмотрение ионных корреляций приводит к сдвигу теоретических значений давления по сравнению с данными ТФД с идеальным газом ионов вплоть до $\sim 45\%$ вдоль изотерм ~ 10 эВ и вплоть до $\sim 65\%$ вдоль ударных адиабат вблизи двукратно сжатого состояния с температурой ~ 20 эВ.
- 5 Наиболее вероятно, что указанный рост давления обусловлен использованием кластерного разложения для ΔF_i^{el} и $F_{e_i}^{id}$. \Rightarrow Методика псевдоатомной МД безальтернативна.



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смесевой плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы



Введение

Ионные корреляции
Основные цели исследования

Теория: ионные корреляции

Обзор моделей

Метод Старретта и Саумона

Случай смесей «Идеальный» газ

Теория 2-ого порядка

Результаты: структура

РФР для смесевой плазмы

Результаты: термодинамика

Изотермы давления

Выводы и перспективы

Благодарим за внимание!

Возврат к титульному листу