

Учреждение Российской академии наук
Объединенный институт высоких температур РАН

На правах рукописи

Шемякин Олег Павлович

**ПОЛУЭМПИРИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ
СОСТОЯНИЯ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ
МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИ
ТОМАСА–ФЕРМИ**

01.04.08 – физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2010

Работа выполнена в *Учреждении Российской академии наук Объединенном институте высоких температур РАН.*

Научный руководитель: *к.ф.-м.н.,
Левашов Павел Ремирович*

Официальные оппоненты: *д.ф.-м.н.
Грязнов Виктор Константинович
д.ф.-м.н.
Шпатаковская Галина Васильевна*

Ведущая организация: *Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е. И. Забабахина»*

Защита состоится 29 декабря 2010 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета Д 002.110.02 при *Учреждении Российской академии наук Объединенном институте высоких температур РАН*, расположенном по адресу: *125412, Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, корпус Л-3, экспозиционный зал.*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке *ОИВТ РАН.*

Автореферат разослан 28 ноября 2010 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Телефон для справок: (495)485-79-77.

Ученый секретарь диссертационного совета,

д.ф.-м.н.



Хомкин А.Л.

© Учреждение Российской академии наук Объединенный институт высоких температур РАН, 2010

Общая характеристика работы

Работа посвящена разработке и использованию полуэмпирических широкодиапазонных уравнений состояния плотной плазмы металлов на основе модели Томаса–Ферми для электронной подсистемы.

Актуальность темы. При воздействии на металлы интенсивных потоков энергии, включая электромагнитное излучение, пучки электронов и ионов, мощные импульсы тока, высокоскоростное пробивание, происходит значительный нагрев и сжатие вещества с последующим его расширением. В таких процессах достигаются температуры и плотности, при которых происходит ионизация вещества, и образуется плотная плазма. Расчет термодинамических свойств неидеальной плазмы, в которой энергия межчастичного взаимодействия сравнима или превосходит кинетическую энергию частиц, представляет собой весьма сложную задачу [1, 2]. Строгие теоретические подходы [3] применимы лишь в ограниченной области фазовой диаграммы и сталкиваются со значительными трудностями при описании квантовых эффектов и связанных состояний. Химическая модель плазмы основана на уравнениях ионизационного равновесия и широко используется для моделирования свойств слабонеидеальной плазмы, однако учет эффектов неидеальности и вырождения представляет собой серьезную теоретическую и методическую проблему, полностью не решенную до настоящего времени [4, 5]. Квантостатистические модели [6] основаны на решении многоэлектронного уравнения Шредингера для изолированного атома или атома в ячейке с различными граничными условиями. Чаще всего в таких моделях рассматривают только свойства электронной подсистемы в приближении сферической ячейки и пренебрегают корреляционными эффектами. В настоящее время для расчета термодинамических свойств плотной плазмы наиболее перспективен метод квантовой молекулярной динамики [7], основанный на методе функционала плотности для электронной подсистемы и методе классической молекулярной динамики для ионов. Тем не менее, этот метод требует большого объема вычислений и может применяться только при сравнительно низких температурах.

Таким образом, несмотря на значительный прогресс в разработке моделей для расчета термодинамических свойств плотной плазмы, при построении уравнений состояния чаще всего используется полуэмпирический подход, в котором в выражение для термодинамического потенциала, обладающее необходимыми асимптотиками, вводятся константы, определяемые путем сопоставления с экспериментальными и расчетными данными [8]. Для описания термодинамических свойств электронов в металлах часто используют выражения, основанные на модели идеального ферми-газа, что является достаточно грубым приближением. С другой стороны, непосредственное использо-

вание для этой цели квантово-статистических моделей является нежелательным, так как эти модели плохо согласуются с экспериментальными данными при низких температурах. Таким образом, существует потребность в создании уравнений состояния, которые можно было бы использовать в широком диапазоне температур и плотностей, включая нормальные условия и область плотной плазмы, что составляет актуальность данной работы.

Цель диссертационной работы состоит в разработке широкодиапазонных уравнений состояния плотной плазмы металлов на основе конечно-температурной модели Томаса–Ферми и их использовании для моделирования различных задач физики высоких плотностей энергии, включая воздействие лазерных импульсов на вещество.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи.

1. Разработана методика расчета вторых производных термодинамического потенциала конечно-температурной модели Томаса–Ферми.
2. Разработана методика расчета теплового вклада электронов в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми с заданной точностью.
3. Проведено сопоставление теплового давления и теплоемкости электронов конечно-температурной модели Томаса–Ферми с методом функционала плотности и полуэмпирическими уравнениями состояния металлов.
4. Построены полуэмпирические уравнения состояния металлов, в которых в качестве теплового вклада электронов используется конечно-температурная модель Томаса–Ферми.
5. Продемонстрировано влияние уравнения состояния на динамику взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с металлом.

Научная новизна

1. В работе впервые разработан способ расчета вторых производных термодинамического потенциала в конечно-температурной модели Томаса–Ферми.
2. Впервые обоснован способ расчета теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми с заданной точностью.
3. Впервые продемонстрировано хорошее согласие теплового вклада электронов в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми с расчетами методом функционала плотности.

4. Впервые построены широкодиапазонные уравнения состояния металлов, в которых в качестве теплового вклада электронов используется конечно-температурная модель Томаса–Ферми.

Научная и практическая ценность

1. Методика расчета термодинамических функций конечно-температурной модели Томаса–Ферми может быть частично использована в других квантово-статистических моделях для повышения точности расчетов.
2. Методика включения теплового вклада электронов, рассчитываемого по квантово-статистическим моделям, может быть использована для расширения области применимости широкодиапазонных уравнений состояния.
3. Таблицы термодинамических функций теплового вклада электронов в конечно-температурную модель Томаса–Ферми могут быть использованы для теоретических и практических расчетов.
4. Полуэмпирические уравнения состояния, полученные в работе, могут быть использованы для гидродинамического моделирования в задачах воздействия мощных потоков энергии на вещество.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения.

1. Методика расчета вторых производных термодинамического потенциала в конечно-температурной модели Томаса–Ферми.
2. Методика расчета теплового вклада электронов в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми с заданной точностью.
3. Результаты сравнения термодинамических функций электронов, вычисленных по конечно-температурной модели Томаса–Ферми, с расчетами методом функционала плотности и широкодиапазонными уравнениями состояния.
4. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния металлов, согласующиеся с экспериментальными данными и содержащие в качестве теплового вклада электронов термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на XX Международной конференции «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество» (Эльбрус, 2005 г.), XXI Международной конференции «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 2006 г.), 33rd EPS Conference on Plasma Physics (Рим, Италия, 2006 г.), International Conference on New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter (Дижон, Франция, 2006 г.), XLIX научной конференции МФТИ (Долгопрудный, 2006 г.), L научной конференции МФТИ (Долгопрудный, 2007 г.), XII Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ (Москва, 2008 г.), XXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter (Эльбрус, 2009 г.), XI Международном семинаре «Супервычисления и математическое моделирование» (Саров, 2009 г.), Международной конференции X Забабахинские научные чтения (Снежинск, 2010 г.).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 17 печатных работах, из них 3 статьи в рецензируемых журналах, 2 статьи в сборниках трудов конференций и 12 тезисов докладов.

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Автором были проведены все расчеты по конечно-температурной модели Томаса–Ферми, построены и доведены до практического использования все разработанные им уравнения состояния. Автор также принимал участие в расчетах методом функционала плотности и в моделировании воздействия ультракоротких лазерных импульсов на вещество. На основании результатов исследования автором сформулированы и обоснованы выводы и заключения, вошедшие в диссертацию.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 4-х глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 122 страницы, включая 36 рисунков и 2 таблицы. Библиография включает 126 наименований.

Содержание работы

Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В обзоре литературы рассмотрены квантово-статистические модели для расчетов термодинамических свойств металлов: модель Томаса–Ферми с различными поправками и модель Хартри–Фока–Слэтера с различными граничными условиями. Проведен анализ достоинств и недостатков этих моделей, обсуждены области их применимости. Приводятся основы метода функ-

ционала плотности и рассматривается его применение для расчетов термодинамических свойств металлов. Анализируются достоинства и недостатки существующих полуэмпирических уравнений состояния металлов с точки зрения их практического использования для моделирования процессов при высоких давлениях и температурах.

В первой главе обсуждается способ вычисления теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми (КТТФ) в широком диапазоне температур и плотностей.

Модель КТТФ сводится к решению краевой задачи, записанной в атомной системе единиц:

$$\begin{cases} W'_u = 2uV; \\ V'_u = 2au^3\theta^{3/2}I_{1/2}\left(\frac{W+u^2\mu}{\theta u^2}\right); \\ W|_{u=0} = \frac{Z}{r_0}, W|_{u=1} = W'_u|_{u=1} = 0. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $W = \varphi - u^2\mu$, φ – безразмерный самосогласованный потенциал Томаса–Ферми, $\varphi(x)/x = \mathcal{V}(r) + \mu$, $0 < x \leq 1$, $x = u^2 = r/r_0$, θ – температура, μ – химический потенциал, $\phi = \varphi/(u^2\theta)$, $a = 4\sqrt{2}r_0^2/\pi$, $v = \frac{4}{3}\pi r_0^3$, r_0 – радиус сферической ячейки, Z – заряд ядра, v – объем атомной ячейки. Функция W является более предпочтительной для численных расчетов по сравнению с φ , т.к. она является монотонной и выпуклой по радиусу ячейки.

Давление, энергия и энтропия электронов в модели КТТФ вычисляются из физических соображений [6, 9, 10]. Например, давление P может быть рассчитано как изменение плотности потока импульса электронов в единицу времени при отражении от границы сферической ячейки; энергия E является суммой кинетической и потенциальной энергий; энтропия S может быть получена из ее статистического определения. Модель КТТФ является термодинамически согласованной, и ее свободная энергия может быть записана в следующем виде [10, 11]:

$$F(v, \theta) = \frac{2\sqrt{2}v\theta^{5/2}}{\pi^2} \left[I_{3/2}\left(\frac{\mu}{\theta}\right) - 8 \int_0^1 u^5 I_{3/2}(\phi) dx + 3 \int_0^1 u^5 \phi I_{1/2}(\phi) dx \right]. \quad (2)$$

Следовательно, все термодинамические параметры могут быть рассчитаны путем дифференцирования выражения (2) в каноническом ансамбле.

Вторые производные термодинамического потенциала (2) можно вычислить численным дифференцированием. Этот подход, однако, является грубым и вычислительно неэффективным. Можно предложить следующий прямой способ вычисления вторых производных термодинамического потенциала F''_{vv} , $F''_{v\theta}$, $F''_{\theta\theta}$. Для этого необходимо найти производные S'_θ , P'_θ , P'_v , которые

выражаются через производные потенциала Томаса–Ферми и химпотенциала по объему и температуре при постоянном числе частиц. В свою очередь, эти производные $(\varphi'_\theta)_{N,v}$, $(\mu'_\theta)_{N,v}$, $(\mu'_v)_{N,\theta}$ можно выразить через аналогичные производные в большом каноническом ансамбле, $(\varphi'_\mu)_{v,\theta}$, $(N'_\mu)_{v,\theta}$, $(N'_v)_{\mu,\theta}$ и $(N'_\theta)_{\mu,v}$. Производные в большом каноническом ансамбле можно вычислить, решая уравнения Пуассона, полученные путем дифференцирования уравнения (1). Например, уравнение для вычисления производной $(\varphi'_\mu)_{v,\theta}$ безразмерного потенциала Томаса–Ферми получается дифференцированием (1) по μ при постоянных v , θ :

$$\begin{cases} \Phi'_u = 2u\Psi; \\ \Psi'_u = au\theta^{1/2} (\Phi + u^2) I_{-1/2}(\phi); \\ \Phi|_{u=1} = \Phi'_u|_{u=1} = 0, \end{cases} \quad (3)$$

где $\Phi = (\varphi'_\mu)_{v,\theta} - u^2$. Тогда $(\partial N/\partial \mu)_{v,\theta} = r_0 \Phi|_{u=0}$.

Тепловой вклад в термодинамические функции при относительно высоких температурах можно вычислить путем вычитания соответствующих величин при $\theta = 0$, например, $P_T(v, \theta) = P(v, \theta) - P(v, 0)$. При низких температурах, однако, чтобы избежать ошибок округления, необходимо использовать асимптотические формулы как в уравнении (1), так и при вычислении производных в большом каноническом ансамбле. Действуя таким образом, можно определить производные свободной энергии по температуре при $\mu/\theta \gg 1$. Однако получить асимптотические выражения для F , F'_v , и F''_{vv} не удастся в силу того, что неизвестны асимптотические выражения для φ , μ и $(\mu'_v)_{N,\theta}$. С другой стороны, можно показать, что P , P'_v , E и другие величины, зависящие от F , F'_v , и F''_{vv} , стремятся к

$$\tilde{C}_0(v) + \tilde{C}_1(v)\theta^2 \quad (4)$$

при малых θ . Коэффициенты $\tilde{C}_1(v)$ в этих зависимостях можно определить путем сравнения с соответствующими формулами при немалых θ при каком-нибудь значении температуры, например, $\mu/\theta = 1000$.

При низких температурах возможна также ситуация, когда вычитание «холодного» вклада (при $\theta = 0$) в термодинамические функции дает существенные вычислительные ошибки даже при $\mu/T \sim 1$. Анализ показал, что такая ситуация возможна для энергии E и свободной энергии F . В этом случае можно воспользоваться первым началом термодинамики:

$$E(v, \theta) - E(v, \theta = 0) = E_T(\theta) = \int_0^\theta \theta_1 S'_\theta(v, \theta_1) d\theta_1. \quad (5)$$

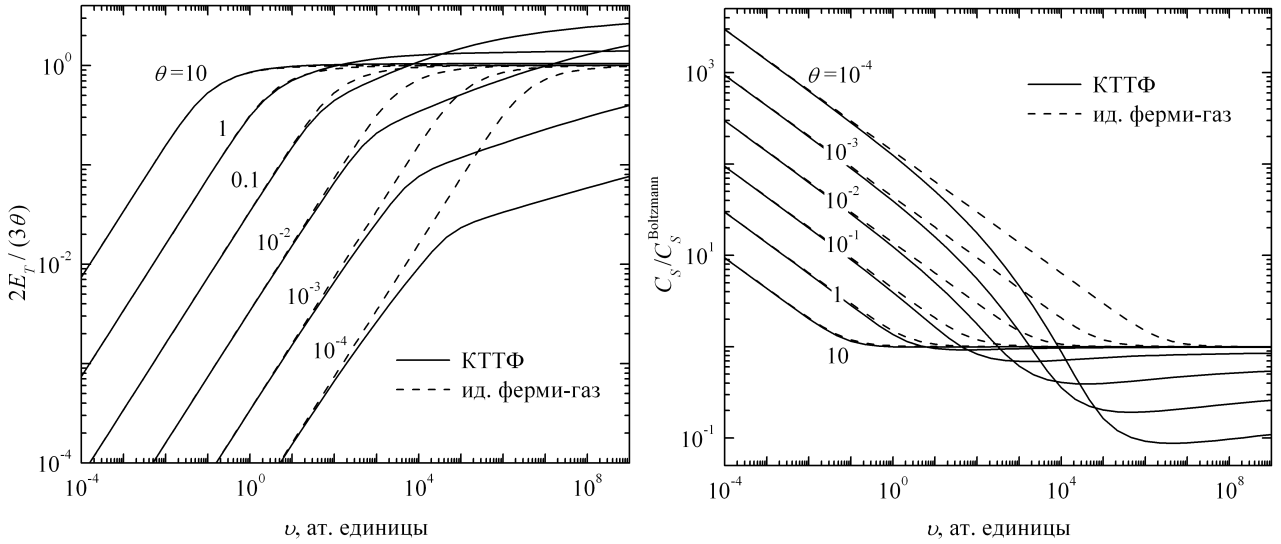


Рис. 1. Тепловая часть энергии модели КТТФ (сплошные линии) и идеального ферми-газа электронов (пунктирные линии) по отношению к энергии идеального бoльцмановского газа в зависимости от объема на изотермах $\theta = 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 0.1, 1, 10$.

Рис. 2. Изoэнтропическая скорость звука модели КТТФ (сплошные линии) и идеального ферми-газа электронов (пунктирные линии) по отношению к скорости звука идеального бoльцмановского газа в зависимости от объема на изотермах $\theta = 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 0.1, 1, 10$.

Для достижения заданной точности для всех термодинамических величин входящие в них интегралы заменяются соответствующими дифференциальными уравнениями [12], а затем получившаяся система дополняется уравнениями Томаса–Ферми (1) и решается методом высокого порядка с автоматическим выбором шага.

В качестве примера была рассчитана тепловая часть энергии (рис. 1) и изoэнтропическая скорость звука (рис. 2) в широком диапазоне объемов на 6 изотермах от $\theta = 10^{-4}$ to $\theta = 10$. Необходимо отметить, что диапазоны температур и объемов, в которых можно проводить расчеты, значительно шире тех, что показаны на рис. 1 и 2. Также на рисунках показано сравнение с моделью идеального ферми-газа. Хорошо видно, что результаты расчетов по модели КТТФ стремятся к пределу идеального Ферми-газа при малых объемах и к пределу идеального бoльцмановского газа при больших объемах. Различие между моделью КТТФ и идеального ферми-газа можно объяснить влиянием взаимодействия, о чем свидетельствует параметр неидеальности $\Gamma = e^2 / (\bar{r}\theta)$ (\bar{r} — среднее межчастичное расстояние между электронами), который обратно пропорционален температуре; этим объясняется, почему различие проявляется сильнее при низких температурах.

Для теоретических и практических расчетов по модели КТТФ были рассчитаны подробные таблицы тепловой части термодинамического потенциала и ее производных вплоть до вторых; также в таблицы включался средний

заряд иона. Диапазон температур в таблицах составляет 12 порядков, а объемов — 14 порядков, что вполне достаточно для большинства приложений.

Результаты первой главы опубликованы в работах [A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7].

Во второй главе производится сравнение расчетов тепловой части модели КТТФ с более точными подходами, основанными на методе функционала плотности, а также с двумя полуэмпирическими уравнениями состояния.

Использовались два подхода в рамках метода функционала плотности. Один из них, полнопотенциальный метод линейных маффин-тин орбиталей (FP-LMTO) [13], основан на программном пакете LMART. Второй метод, VASP [14], использует для своей работы псевдопотенциалы для электронов кора и идеологию метода функционала плотности для валентных электронов.

При сравнении с полуэмпирическими уравнениями состояния в качестве первой модели использовался тепловой вклад электронов в потенциал свободной энергии $F_e = F_e(\rho, T)$ многофазного уравнения состояния алюминия [15]. В качестве второй модели использовалась простая аппроксимация тепловой части свободной энергии идеального ферми-газа $F_e(\rho, T, Z)$. Вторая модель содержит число свободных электронов Z_1 на одну тяжелую частицу в качестве входного параметра. Для сравнений использовалось постоянное значение $Z_1 = Z_0$, соответствующее числу валентных электронов в металле при $P = 1$ бар и $\rho = \rho_0$.

На рис. 3 показана теплоемкость при постоянном объеме в вольфраме, рассчитанная по различным моделям (FP-LMTO, VASP, КТТФ) для случая холодных ионов и нагретых электронов на изохоре $\rho = \rho_0$. В методах FP-LMTO и VASP ионы располагались в узлах кристаллической решетки, гцк для Al и оцк для вольфрама. В методе VASP электроны $3s^2, 3p^1$ для алюминия и $5d^4, 6s^2$ для вольфрама считались валентными.

Различия между моделями FP-LMTO и VASP на рис. 3 вызваны, в основном, эффектом теплового возбуждения электронов кора, который не принимается в расчет в псевдопотенциальных подходах. Если максимальный уровень энергии кора обозначить как E_c^H , а минимальный уровень энергии валентных электронов E_o^L , то число электронов кора, энергия которых превысит E_c^H из-за теплового возбуждения, можно оценить следующим образом:

$$N_e(\rho, T) = 2 \sum_{\epsilon < E_c^H} [1 - f(\epsilon, \rho, T)], \quad (6)$$

где $f = (1 + \exp[(\epsilon - \mu(\rho, T))/T])^{-1}$ — функция Ферми–Дирака, μ — химический потенциал. Параметр N_e также показан на рис. 3.

Энергетическая щель между максимальным уровнем энергии кора и минимальным уровнем энергии валентной зоны для вольфрама $\Delta E^W \approx 24$ эВ. Поэтому разница между FP-LMTO и VASP для W на рис. 3 проявляется

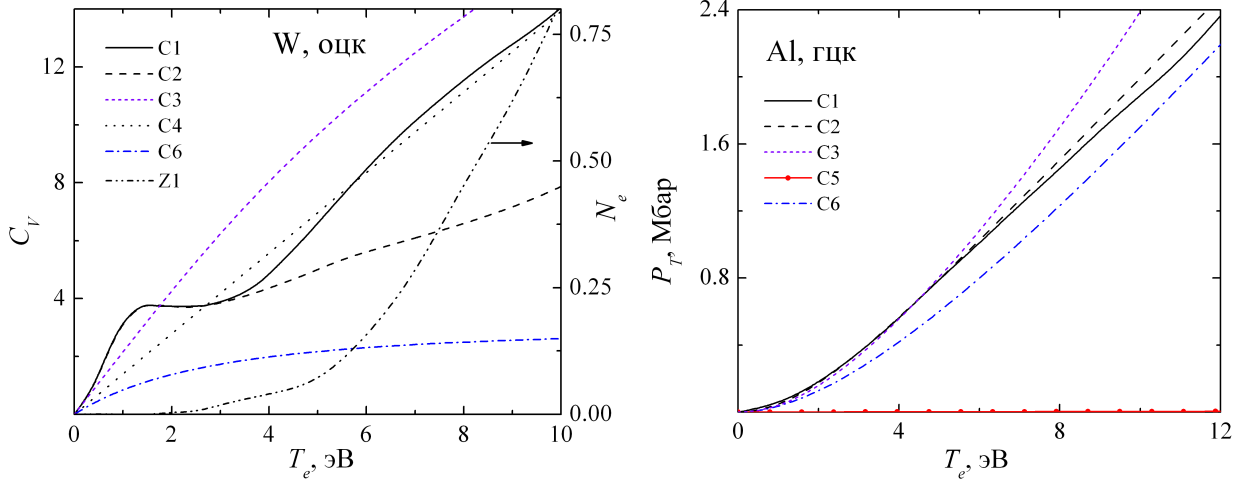


Рис. 3. Теплоемкость электронов при постоянном объеме C_V и число возбужденных электронов кора N_e (в расчете на одну тяжелую частицу) в зависимости от температуры электронов T_e для оцк W при $\rho = \rho_0$. Линии: C1 — полноэлектронный расчет методом функционала плотности, FP-LMTO; C2 — псевдопотенциальный расчет методом функционала плотности, VASP; C3 — КТТФ; C5 — тепловой вклад электронов из уравнения состояния для Al [15]; C6 — уравнение состояния [16] с постоянным числом свободных электронов $Z_0 = 2$ (W); Z1 — число возбужденных электронов кора по расчетам методом FP-LMTO (правая ось).

Рис. 4. Тепловое давление электронов P_T в зависимости от температуры электронов T_e для гцк-решетки Al на изохоре $\rho = \rho_0$. Обозначения те же, что и на рис. 3; $Z_0 = 3$ для Al.

уже при достаточно низких электронных температурах ($T_e \gtrsim 3$ эВ), когда тепловое возбуждение электронов кора становится заметным.

Эффект возбуждения электронов кора может быть проиллюстрирован путем сравнения плотности состояний (DOS) для подходов FP-LMTO и VASP. На рис. 5 показаны плотности состояний для W при $T = 2$ эВ и $\rho = \rho_0$. Хорошо видно, что эти функции практически совпадают друг с другом, за исключением узкого и высокого пика при $\epsilon - \mu \approx -28$ эВ, вызванного присутствием $4f$ -электронов в расчетах FP-LMTO. При температурах $T \gtrsim 3$ эВ эти электроны начинают возбуждаться; так, на рис. 5 показаны функции Ферми-Дирака для $T = 2$ и 10 эВ и хорошо видно, что при 10 эВ возбуждаются все электроны в указанном на рис. 5 диапазоне $\epsilon - \mu$. Т. к. f -электроны в методе VASP включаются в псевдопотенциал, это приводит к различиям между FP-LMTO и VASP. Похожий эффект наблюдается для Al, но в этом случае $2p$ электроны включаются в кор и, следовательно, не могут возбуждаться.

Метод КТТФ переоценивает теплоемкость при постоянном объеме как для Al, так и для W, но вполне удовлетворительно воспроизводит результаты метода FP-LMTO. Следует отметить, что модель КТТФ не содержит оболочечных эффектов [10], и по этой причине зависимости термодинамиче-

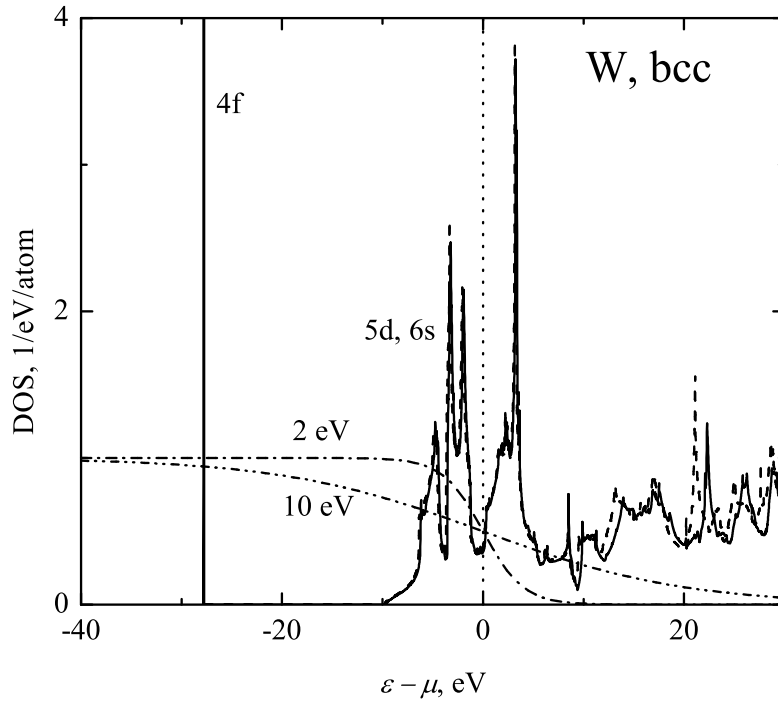


Рис. 5. Плотность состояний для W при $T = 2$ эВ, рассчитанная методом FP-LMTO (сплошная линия) и VASP (пунктирная линия). Также показаны функции Ферми–Дирака при $T = 2$ эВ (штрих-пунктирная линия) и $T = 10$ эВ (пунктир с двумя штрихами).

ских функций не содержат осцилляций; эта особенность модели КТТФ хорошо заметна на рис. 3.

Также вычислялось тепловое давление электронов P_T на изохоре $\rho = \rho_0$ по различным моделям для Al и W, $P_T = P(\rho, T) - P(\rho, 0)$. Как видно из рис. 4, давления, полученные методами FP-LMTO и VASP для Al, хорошо согласуются между собой; этот факт можно объяснить близким числом почти свободных электронов в этих подходах и практически одинаковыми обменно-корреляционными функционалами, использовавшимися в расчетах. Модель КТТФ дает несколько бóльший рост теплового давления с температурой, чем FP-LMTO и VASP; такое различие можно приписать как погрешностям самой модели КТТФ, так и неучету теплового возбуждения в обменно-корреляционном функционале метода функционала плотности.

Полуэмпирическое уравнение состояния алюминия [15] дает сильно заниженное тепловое давление электронов на рассматриваемых изохорах; соответствующая кривая практически совпадает с осью абсцисс на рис. 4.

Уравнение состояния [16] для Al с постоянным числом свободных электронов $Z_0 = 3$ показывает хорошее согласие с методами функционала плотности и моделью КТТФ (рис. 4); в случае вольфрама та же модель с $Z_0 = 2$ дает существенно меньшее тепловое давление электронов. Таким образом, пример вольфрама свидетельствует о том, что тепловое возбуждение электронов нижних уровней ($5d$ и $4f$ для вольфрама) дает существенный вклад

в термодинамические функции, и необходимо принимать в расчет этот эффект в моделях уравнения состояния для электронов. Выявленные различия являются мотивацией для построения более совершенных полуэмпирических уравнений состояния металлов.

Результаты второй главы опубликованы в работе [А8].

В третьей главе построены широкодиапазонные уравнения состояния по различным моделям для алюминия, меди, вольфрама, магния и золота, в которых в качестве теплового вклада электронов используется модель КТТФ.

Для описания термодинамических свойств алюминия и меди использована свободная энергия F , которая представляется суммой трех слагаемых, отвечающих за упругую часть взаимодействия при $T = 0$ К (F_c) и тепловой вклад ядерной (F_a) и электронной (F_e) компонент,

$$F(V, T) = F_c(V) + F_a(V, T) + F_e(V, T). \quad (7)$$

Первые два слагаемых заданы в виде интерполяционных выражений, а учет последнего осуществляется по модели КТТФ.

Для холодной кривой использовались интерполяционные выражения, различные в области сжатия и разрежения. Неизвестные коэффициенты в этих выражениях подбирались таким образом, чтобы обеспечить правильную асимптотику к модели Томаса–Ферми с квантовыми и обменными поправками в области сильного сжатия, табличные значения удельного объема, модуля сжатия и его производной по давлению при нормальных условиях и справочную величину энергию сублимации.

Вклад теплового движения ядерной компоненты в свободную энергию задается следующим образом:

$$F_a(V, T) = 3RT \ln \left(1 - \exp \left(-\theta/T - \sqrt{T_a \sigma^{2/3}/T} \right) \right), \quad (8)$$

$$\theta(V) = \theta_0 \sigma^{2/3} \exp \left((\gamma_0 - 2/3) \frac{B^2 + D^2}{B} \operatorname{arctg} \frac{B \ln \sigma}{B^2 + D (\ln \sigma + D)} \right), \quad (9)$$

где $\sigma = V_0/V$, γ_0 — значение коэффициента Грюнайзена при нормальных условиях. Коэффициенты θ_0 , B , D , T_a являются подгоночными и определяются из условия наилучшего соответствия данным ударно-волновых экспериментов.

На рис. 6 приведена ударная адиабата алюминия до давлений 10^5 Мбар в сравнении с экспериментальными данными. Видно, что в пределах погрешности измерений наблюдается хорошее согласие во всем диапазоне исследованных давлений. Также на рис. 6 пунктиром показана ударная адиабата, вычисленная без учета теплового вклада электронов.

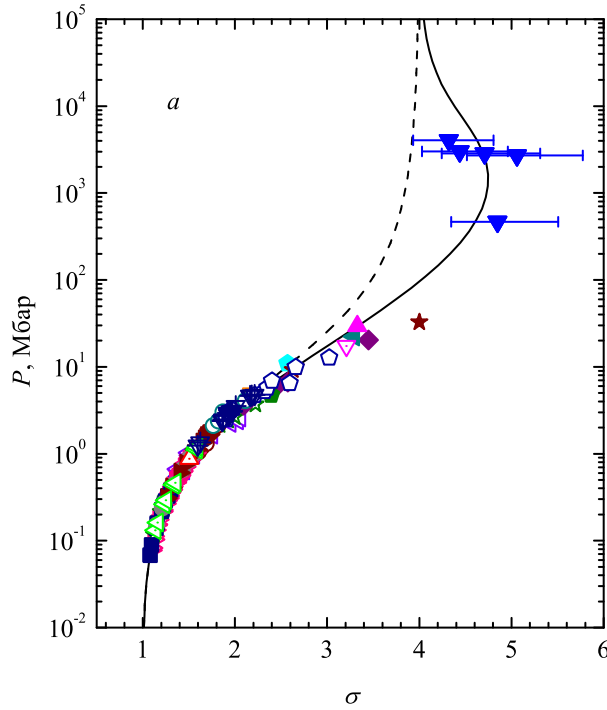


Рис. 6. Ударная адиабата алюминия в координатах давление–степень сжатия. Сплошные линии и пунктир — расчет с учетом и без учета теплового вклада электронов. Значки — экспериментальные данные.

На рис. 7 приведены результаты расчетов изоэнтроп разгрузки алюминия в сопоставлении с экспериментальными данными. На рис. 8 показана основная ударная адиабата, коэффициент Грюнайзена на ударной адиабате и средняя степень ионизации Z_i/Z , рассчитанная по двум моделям (Z_i — заряд иона, Z — заряд ядра). Видно, что максимальная степень сжатия на ударной адиабате и минимум коэффициента Грюнайзена находятся в области термической ионизации алюминия.

Также были построены уравнения состояния для вольфрама, магния и золота с использованием альтернативных выражений для F_c и F_a . Кроме того, для проведения расчетов воздействия ультракоротких лазерных импульсов на вещество в уравнении состояния [17] для алюминия тепловой вклад электронов, рассчитанный по модели идеального ферми-газа, заменялся на соответствующий вклад модели КТТФ.

Результаты третьей главы опубликованы в работах [A7, A9, A10, A11, A12, A13, A14, A15, A16, A5, A17].

В четвертой главе производилась апробация построенных уравнений состояния для расчетов воздействия ультракоротких лазерных импульсов на вещество. Моделирование проводилось по одномерной двухтемпературной одножидкостной гидродинамической модели [18] с учетом электрон-ионного обмена и электронной теплопроводности. Поглощение лазерного излучения

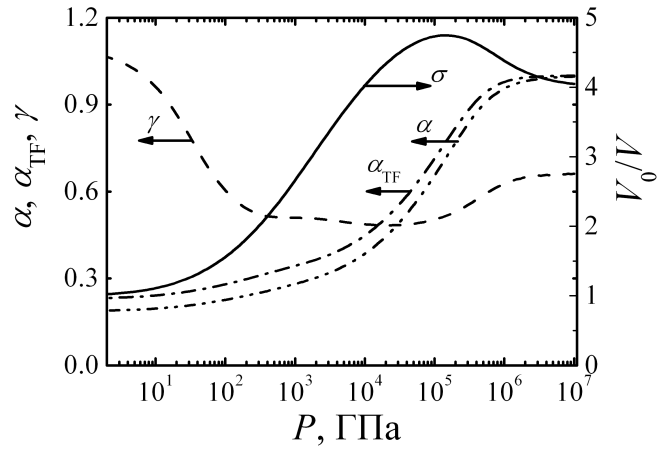
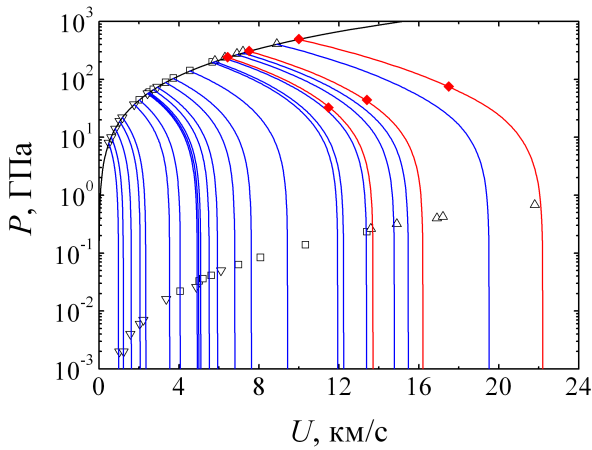


Рис. 7. Изоэнтропы разгрузки алюминия в координатах давление–массовая скорость. Линии — расчет по уравнению состояния, значки — экспериментальные данные.

Рис. 8. Степень сжатия (сплошная линия), коэффициент Грюнайзена (пунктирная) и средняя степень ионизации, рассчитанная по двум моделям (штрих-пунктирные линии), на ударной адиабате алюминия в зависимости от давления.

рассчитывалось путем решения уравнения Гельмгольца для напряженности электрического поля.

Моделировался импульс с потоком мощности 10^{12} Вт/см², длительностью 10 пс и длиной волны 800 нм. Максимум импульса приходился на момент времени 50 пс. Было выполнено два расчета. В первом использовалось многофазное уравнение состояния алюминия [17], в котором в качестве теплового вклада электронов фигурировало выражение для идеального ферми-газа (УРС1). Во втором также использовалось многофазное уравнение состояния алюминия, но в качестве теплового вклада электронов использовалась модель КТТФ (УРС2). Остальные параметры моделирования не менялись.

Отличия в результатах моделирования обусловлены большей теплоемкостью в модели КТТФ из-за возбуждения электронов внутренних оболочек при температурах $T \gtrsim 8$ эВ. Число свободных электронов в диапазоне параметров моделирования практически не менялось, соответственно, тепловые давления по модели КТТФ и идеального ферми-газа были близки друг к другу. На рис. 9 показаны температура и давление электронов и ионов на момент времени $t = 50$ пс. Видно, что как температура, так и давление электронов в веществе мишени меньше при использовании модели УРС2, чем при использовании модели УРС1. Кроме того, для модели УРС2 глубина прогрева мишени была меньше, чем для УРС1. Указанные различия приводят к тому, что для модели УРС2 коэффициент отражения при $t \sim 80$ пс оказывался больше, чем для модели УРС1 примерно на 30%, что вполне может быть зафиксировано в эксперименте.

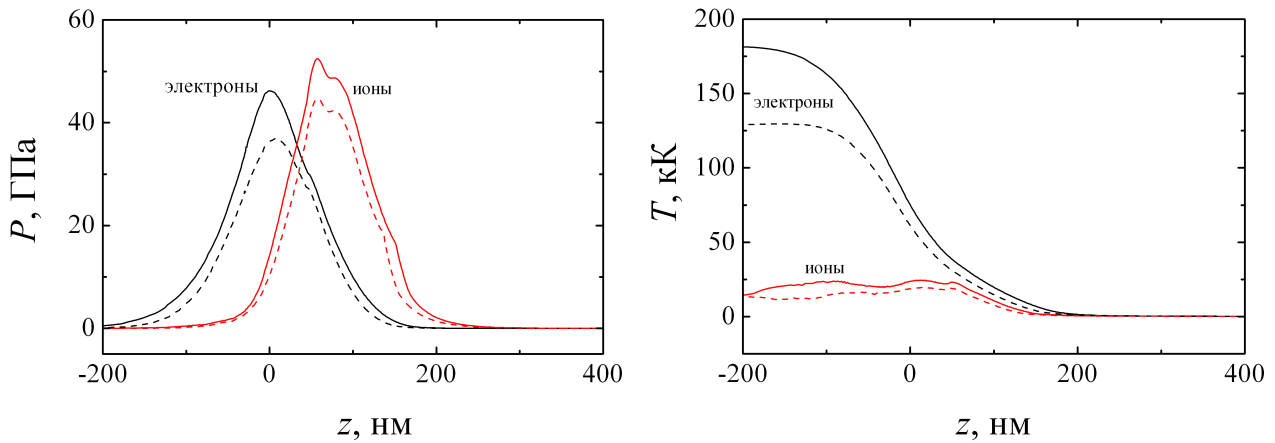


Рис. 9. Давление (слева) и температура (справа) в мишени Al, облученной лазерным импульсом длительностью 10 пс с плотностью мощности 10^{12} Вт/см² и длиной волны 800 нм на момент времени $t = 50$ пс. Сплошные линии — расчет с использованием модели УРС1, пунктирные — модели УРС2.

Проведенные аналогичные расчеты для фемтосекундных лазерных импульсов показывают меньшие отличия для двух моделей уравнения состояния УРС1 и УРС2.

Результаты четвертой главы опубликованы в работах [A1, A6, A8].

В Заключение сформулированы основные результаты работы.

1. Разработана методика расчета вторых производных термодинамического потенциала свободной энергии в конечно-температурной модели Томаса–Ферми. Показано, что эта методика применима в большом диапазоне температур и плотностей и может быть использована для построения широкодиапазонных уравнений состояния.
2. Разработана методика расчета теплового вклада электронов в термодинамические функции в конечно-температурной модели Томаса–Ферми. Показано, что при достаточно низких температурах необходимо использовать асимптотические выражения для термодинамического потенциала и его производных, чтобы избежать ошибок округления.
3. Рассчитаны подробные таблицы термодинамического потенциала и его производных для теплового вклада электронов в конечно-температурную модель Томаса–Ферми. Эти таблицы могут использоваться для вычисления термодинамических функций электронов при разработке уравнений состояния.
4. Построены широкодиапазонные уравнения состояния алюминия, меди, вольфрама, магния и золота, в которых в качестве ионной части использовалось полуэмпирическое выражение, а в качестве теплового вклада электронов — тепловая часть конечно-температурной модели То-

маса–Ферми. Показано согласие построенных уравнений состояния с данными ударно-волновых экспериментов.

5. Проведена верификация построенных уравнений состояния при их использовании в расчетах воздействия ультракоротких лазерных импульсов на вещество. На примере алюминия продемонстрированы и объяснены различия в результатах моделирования для уравнений состояния, основанных на модели идеального Ферми-газа и конечно-температурной модели Томаса–Ферми.

Список публикаций

- A1. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Obruchkova L. R., Khishchenko K. V. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2010. Vol. 43, no. 33. P. 335003.
- A2. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Использование метода самосогласованного поля Хартри для уточнения термодинамических функций вещества в модели Томаса–Ферми // XLIX научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный, Россия, 24–25 ноября 2006 г. 2006.
- A3. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Расчет термодинамических свойств металлов на основе модели Хартри–Фока–Слэтера // Теплофизические свойства веществ и материалов. Тезисы докладов XII Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ. 7–10 октября 2008 г. Москва: 2008. С. 153.
- A4. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Расчет термодинамических параметров вещества при высоких плотностях энергии в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера // Труды 51-й Научной конференции МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук». Часть VIII. Проблемы современной физики. Москва: МФТИ, 2008. С. 267.
- A5. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Khishchenko K. V. Thermodynamic characteristics of metals with basis on Hartree–Fock–Slater model // XXIV International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter. March 1–6, 2009, Elbrus, Russia. Book of Abstracts / Ed. by V. E. Fortov et al. Chernogolovka: IPCP RAS, 2009. P. 156.
- A6. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Khishchenko K. V., Obruchkova L. R. Thermal contribution to thermodynamic functions in Thomas–Fermi model // *Physics of Extreme States of Matter–2010* / Ed. by V. E. Fortov et al. Chernogolovka: IPCP RAS, 2010. Pp. 27–30.

- A7. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Тепловой вклад электронов в модели Томаса–Ферми и уравнения состояния металлов // Тезисы докладов международной конференции X Забабахинские научные чтения. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2010. С. 228.
- A8. Levashov P. R., Sin'ko G. V., Smirnov N. A. et al. Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state // J. Phys.: Condens. Matter. 2010. Vol. 22. P. 505501.
- A9. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Obruchkova L. R., Khishchenko K. V. Разработка широкодиапазонного уравнения состояния металлов на основе модели Томаса–Ферми // Физ. обр. в ВУЗах. 2010. Т. 16, № 1. С. П26.
- A10. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Полуэмпирическое уравнение состояния на основе модели Томаса–Ферми // Тезисы XX Международной конференции «Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество» / Под ред. В. Е. Фортова и др. Черногловка: ИПХФ РАН, 2005. С. 108–109.
- A11. Хищенко К. В., Шемякин О. П. Полуэмпирическое уравнение состояния алюминия на основе модели Томаса–Ферми // Физика экстремальных состояний вещества — 2006 / Под ред. В. Е. Фортова и др. Черногловка: ИПХФ РАН, 2006. С. 261–263.
- A12. Хищенко К. В., Шемякин О. П. Полуэмпирическое уравнение состояния алюминия на основе модели Томаса–Ферми // Тезисы XXI Международной конференции «Уравнения состояния вещества» / Под ред. В. Е. Фортова и др. Черногловка: ИПХФ РАН, 2006. С. 23.
- A13. Khishchenko K. V., Shemyakin O. P. Electrical conductivity of strongly coupled tungsten plasma: measurements interpretation using different equations of state // 33rd EPS Conference on Plasma Physics. Roma, Italy, June 19-23, 2006. Contributed papers. ECA, 2006. P. P4.064.
- A14. Khishchenko K. V., Shemyakin O. P. Equation of state for aluminum based on Thomas-Fermi model // International Conference on New Models and Hydrocodes for Shock Wave Processes in Condensed Matter, Dijon, France, 9–14 April, 2006. Abstracts. 2006. P. 59.
- A15. Khishchenko K. V., Shemyakin O. P. Equation of state for aluminum based on Thomas-Fermi model // 33rd European Physical Society Conference on Plasma Physics. Roma, Italy, June 19–23, 2006. Book of Abstracts. Frascati: 2006. P. 467.

- A16. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Использование модели Хартри-Фока-Слэтера для расчета уравнения состояния алюминия при высоких температурах и давлениях // L научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный, Россия, 23 ноября 2007 г. 2007.
- A17. Шемякин О. П., Хищенко К. В. Широкодиапазонное уравнение состояния металлов на основе модели Томаса-Ферми // XI Международный семинар «Супервычисления и математическое моделирование», Саров, 5–9 октября 2009 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2009. С. 112–113.

Цитированная литература

1. Норман Г. Э., Старостин А. Н. Термодинамика сильно неидеальной плазмы // Теплофизика высоких температур. 1970. Т. 8, № 2. С. 413–438.
2. Фортов В. Е., Храпак А. Г., Якубов И. Т. Физика неидеальной плазмы. Москва: Физматлит, 2004.
3. Ebeling W., Kraeft W. D., Kremp D. Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids. Berlin: Akademie-Verlag, 1976.
4. Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Фортов В. Е. Термодинамика ударно-сжатой плазмы в представлениях химической модели // Под ред. В. Е. Фортова, Л. В. Альтшулера, Р. Ф. Трунина, А. Фунтикова. Москва: Наука, 2000. С. 299–387.
5. Хомкин А. Л., Муленко И. А., Шумихин А. С. Базовые химические модели неидеальной атомарной плазмы // Теплофизика высоких температур. 2004. Т. 42, № 6. С. 835–842.
6. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселадновых пробегов и уравнений состояния. Москва: Физико-математическая литература, 2000.
7. Car R., Parrinello M. Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory // Phys. Rev. Lett. 1985. — Nov. Vol. 55, no. 22. Pp. 2471–2474.
8. Бушман А. В., Фортов В. Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т. 140, № 2. С. 177–232.

9. Feynman R. P., Metropolis N., Teller E. Equation of state of elements based on the generalized Fermi–Thomas theory // *Phys. Rev.* 1949. Vol. 75, no. 10. Pp. 1561–1573.
10. Киржниц Д. А., Лозовик Ю. Е., Шпатаковская Г. В. Статистическая модель вещества // *Успехи физических наук.* 1975. Т. 117, № 1. С. 3–47.
11. Brachman M. K. Thermodynamic functions on the generalized Fermi–Thomas theory // *Phys. Rev.* 1951. Vol. 84. P. 1263.
12. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. Препринт 35. Москва: ИПМ АН СССР, 1975.
13. Savrasov S. Y. Linear-response theory and lattice dynamics: a muffin-tin-orbital approach // *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54, no. 23. Pp. 16470–16486.
14. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B.* 1996. — Oct. Vol. 54, no. 16. Pp. 11169–11186.
15. Bushman A. V., Fortov V. E., Kanel' G. I., Ni A. L. Intense Dynamic Loading of Condensed Matter. Washington: Taylor & Francis, 1993.
16. Агранат М. Б., Андреев Н. Е., Ашитков С. И. и др. Определение транспортных и оптических свойств неидеальной плазмы твердотельной плотности при фемтосекундном лазерном воздействии // *Письма в ЖЭТФ.* 2007. Т. 85, № 6. С. 328–333.
17. Povarnitsyn M. E., Itina T. E., Sentis M. et al. Material decomposition mechanisms in femtosecond laser interactions with metals // *Phys. Rev. B.* 2007. — Jun. Vol. 75, no. 23. P. 235414.
18. Povarnitsyn M. E., Itina T. E., Khishchenko K. V., Levashov P. R. Suppression of Ablation in Femtosecond Double-Pulse Experiments // *Phys. Rev. Lett.* 2009. — Nov. Vol. 103, no. 19. P. 195002.