первопринципные методы расчета термодинамических и транспортных свойств неидеальной плазмы металлов

П.Р. Левашов

Объединенный институт высоких температур РАН, [pasha@jiht.ru](mailto:pasha@jiht.ru)

Неидеальная плазма возникает во многих задачах современной физики, в том числе в существующих и перспективных энергоустановках, при воздействии мощных потоков электромагнитного излучения на вещество, в сильноточных устройствах, в астрофизике, геофизике, металлургии и т.п. В частности, при описании физических свойств жидких металлов и электролитов эти системы необходимо рассматривать как плазму с сильным межчастичным взаимодействием. Плотная плазма металлов, кроме того, обладает и сильновырожденной электронной подсистемой, что чрезвычайно затрудняет адекватный теоретический анализ. Неудивительно, что до недавнего времени существовали лишь весьма грубые качественные модели для расчетов термодинамических и транспортных свойств неидеальной плазмы. Появление классических атомистических методов моделирования, таких как метод Монте-Карло и молекулярной динамики, значительно улучшило ситуацию с описанием классических моделей плазмы, в частности, однокомпонентной плазмы [1] и полностью ионизованной двухкомпонентной плазмы [2]. Тем не менее, для вырожденных систем классические подходы неприменимы даже на качественном уровне.

В докладе будет приведен обзор так называемых первопринципных методов расчета термодинамических, транспортных и оптических свойств сильнонеидеальной вырожденной плазмы, то есть подходов, в которых не используется эмпирическая информация, за исключением заряда и массы ядер составляющих вещество элементов, а также фундаментальных физических констант. Будут рассмотрены квазиклассические подходы, такие как метод Томаса-Ферми с различными поправками, модели среднего атома [3], метод Монте-Карло с интегралами по траекториям [4], метод функционала плотности и метод квантовой молекулярной динамики [5]. Результаты моделирования будут сравниваться с ударно-волновыми экспериментальными данными, с экспериментами для жидких металлов; кроме того, будут приведены примеры первопринципных оценок критических параметров металлов. Для первопринципных расчетов транспортных и оптических свойств будут привлекаться кинетические модели в приближении времени релаксации, модель Займана, формула Кубо-Гринвуда и преобразование Крамерса-Кронига. Результаты будут сравниваться с экспериментальными данными статических и динамических экспериментов. Анализ различных методов показывает, что современные подходы, основанные на методе квантовой молекулярной динамики и формуле Кубо-Гринвуда, позволяют в рамках одной модели с хорошей точностью рассчитывать весь комплекс теплофизических свойств неидеальной вырожденной плазмы. Это, в свою очередь, дает возможность построения широкодиапазонных аппроксимационных моделей нового поколения, необходимых для континуального моделирования задач воздействия мощных потоков энергии на металлы. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант 20-42-04421.

Литература

1. Hansen J. P. Physical Review A, 1973, V. 8, P. 3096.
2. Hansen J. P., McDonald I. R. Physical Review A, 1981, Т. 23, С. 2041.
3. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000.
4. Ebeling W., Fortov V. E., Filinov V. Quantum Statistics of Dense Gases and Nonideal Plasmas. Springer International Publishing, 2017.
5. Martin R. M. Electronic structure: basic theory and practical methods. Cambridge university press, 2020.