

ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИ СРЕДНЕГО АТОМА ДЛЯ РАСЧЕТОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕКОТОРЫХ ВЕЩЕСТВ ПРИ МЕГАБАРНЫХ ДАВЛЕНИЯХ

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

vrbv@mail.ru

В последние десятилетия значительные усилия были предприняты для исследования теплофизических свойств плотной плазмы. Эти исследования в значительной степени связаны с появлением новых экспериментальных установок. Для получения сверхвысоких давлений, которые не могут быть достигнуты в традиционных взрывных устройствах и легкогазовых пушках, используются, например, мощные генераторы тока и ультракороткие лазеры.

Эксперименты на этих новых установках позволяют получить информацию о различных свойствах неидеальной плазмы, могут быть использованы для создания широкого диапазона уравнений состояния и проверки различных теоретических подходов и численных методов. Описание дейтерия, азота и некоторых других веществ при мегабарных давлениях представляет большой интерес в физике конденсированных сред в экстремальных условиях, так как давление вызывает делокализацию электронов и приводит к образованию новых структур. В случае молекулярного азота большая энергия тройной связи делает это состояние достаточно устойчивым к внешним воздействиям, что следует из результатов статических [1] и динамических [2] экспериментов, отражающих некоторые структурные и электронные изменения азота при мегабарных давлениях и высоких температурах ($T \geq 1$ эВ). Для расчета термодинамических свойств веществ при высоких давлениях используется метод сферических ячеек совместно с самосогласованным приближением функционала плотности и блоховскими граничными условиями (квази-зонный метод). Этим методом рассчитаны термодинамические функции, ударные адиабаты и зонная структура азота, дейтерия и других веществ при мегабарных давлениях и высоких плотностях. Эти расчеты подтверждает недавно обнаруженный экспериментально резкий рост давления вдоль ударной адиабаты в узком диапазоне плотностей.

[1]. R. F. Trunin, G. V. Boriskov, A. I. Bykov, A. B. Medvedev, G. V. Simakov, and A. N. Shuikin, *Pis'maZh. Eksp. Teor.Fiz.* 88 (3), 220 (2008) [*JETP Lett.* 88 (3), 189 (2008)].

[2]. M. A. Mochalov, M. V. Zhernokletov, R. I. Il'kaev, A. L. Mikhailov, V. E. Fortov, V. K. Gryaznov, I. L. Iosilevskiy, A. B. Mezhevov, A. E. Kovalev, S. I. Kirshanov, Yu. A. Grigor'eva, M. G. Novikov, and A. N. Shuikin, *JETP.* 110, 67, (2010).