

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

том 7 номер 12 год 1995

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

НЕКОТОРЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕДИ

© О.Б. Денисов, Н.Ю. Орлов

Институт математического моделирования РАН

Работа проведена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект "ТЕФИС" № 92-012-861)

Проводится сравнение средних коэффициентов поглощения света в меди, рассчитанных по ионной модели вещества, модели Хартри-Фока-Слэтера и данным библиотеки SESAME.

THE COMPARISON OF THEORETICAL RESULTS FOR OPTICAL PROPERTIES OF MATTER OBTAINED BY USING OF DIFFERENT THEORETICAL MODELS

O.B. Denisov, N.Y. Orlov

The comparison of average light absorption coefficients for Cu obtained by using the Ion Model of Matter, the Hartree-Fock-Slater model and results of SESAME are performed.

Для решения многих научных и технологических задач, возникающих при исследованиях по управляемому термоядерному синтезу, в космических исследованиях и в ряде других областей, необходимо располагать достаточно точной и достоверной информацией о свойствах вещества в условиях экстремально высоких температур и плотностей.

На протяжении ряда лет одним из наиболее продуктивных методов являлось создание теоретических моделей вещества, позволяющих рассчитать такие его характеристики, как спектральные коэффициенты поглощения света, пробеги по Планку или Росселанду и так далее в тех областях температур и плотностей, где справедливы физические приближения, лежащие в основе той или иной модели. Первым шагом на этом пути было создание модели Томаса-Ферми [1], область применимости которой ограничена очень высокими температурами и плотностями вещества вследствие довольно грубых физических приближений, лежащих в основе этой модели. Учет более тонких физических явлений привел к созданию модели Томаса-Ферми с поправками [2,3], область применимости которой оказалась заметно шире. Еще более широкой областью применимости обладает разработанная вслед за этим модель Хартри-Фока-Слэтера [4,5]. Наконец, в последнее время была предложена ионная модель вещества (ИМ) [6], которая позволяет получать надежные результаты при температурах вплоть до нескольких электронвольт.

В данной работе проводится сравнение средних по Росселанду коэффициентов поглощения K_R ($\text{см}^2/\text{г}$) в зависимости от температуры вещества, рассчи-

танных по моделям ХФС [7] (—), данным библиотеки SESAME [8] (° ° °) и результатам расчетов по ИМ (---) для меди при $\rho=0.1$ г/см³ (рис. 1).

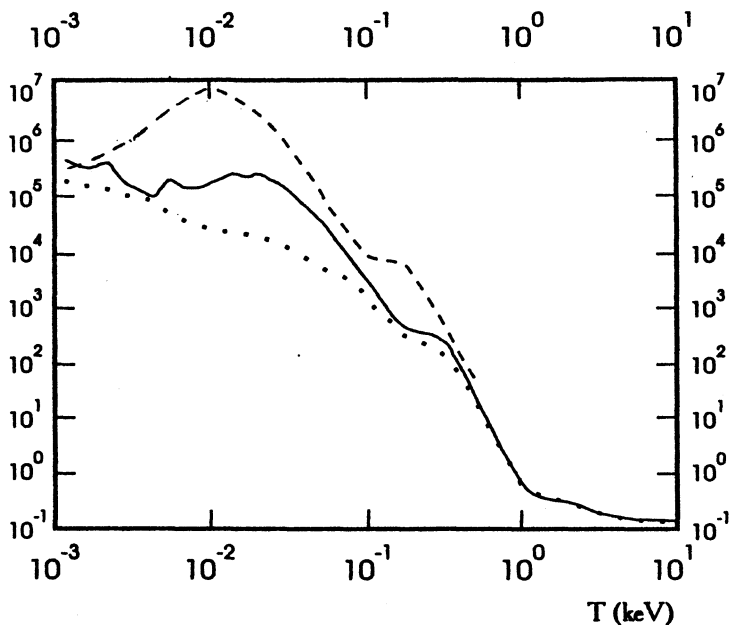


Рис.1

Надо отметить, что среди указанных моделей только ИМ дает надежное совпадение результатов с многочисленными экспериментальными данными [6,9]. Что касается данных библиотеки SESAME, подобные результаты не публиковались, а сравнение с экспериментом результатов модели ХФС в ряде случаев проводилось некорректно. Так, в [7] при расчете энергий переходов для тяжелых элементов авторы специально подбирали в расчетах значения температуры и плотности вещества, чтобы электронные конфигурации среднего атома совпадали с конфигурациями, участвующими в переходах.

Сравнение результатов, приведенных на рис. 1, показывает, что данные рассматриваемых моделей согласуются между собой лишь при температуре выше 0.5 keV. При более низких температурах данные ИМ заметно отличаются от данных двух других моделей, причем при температурах около 10 электронвольт различие ИМ с моделью ХФС достигает десятков раз, а с данными SESAME — сотен раз.

На наш взгляд, это свидетельствует о том, что применение данных ХФС или SESAME при расчетах, например, сжатия лазерных мишеней, может приводить к ощутимым ошибкам.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *R. Feynman, M. Metropolis, M. Teller.* Equation of state of element based on the generalized Fermi-Thomas theory. *Phys. Rev.*, 1949, v. 75, № 10, p. 1561-1573.
2. *Д.А. Киржниц.* Квантовые поправки к уравнению Томаса-Ферми. *ЖЭТФ*, 1957, т. 32, № 1, с. 115-123.
3. *Н.Н. Калиткин, Л.В. Кузмина.* Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР, 1975, № 35.
4. *V.F. Roznyai.* Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density. *Phys. Rev.* 1972, v. 5A, № 3, p. 1137-1149.
5. *А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров.* Описание состояния вещества в области высоких температур на основании уравнений самосогласованного поля. Численные методы механики сплошной среды. 1973, т. 4, с. 114-119.
6. *Н.Ю. Орлов.* Ионная модель вещества. Математическое моделирование. 1992, т. 4, № 8, с. 20-30.
7. *В.Г. Новиков, А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров, В.В. Драгалов.* О поглощении фотонов в высокотемпературной плазме. Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 1992, № 17.
8. *G.D. Tsakiris, K. Eidman.* Au approximate method for calculating Plank and Rosseland mean opacities in hot dense plasmas, *JQSRT.* 1987, v. 38, № 5, p. 353-368.
9. *Н.Ю. Орлов.* Вариационный подход к определению энергетического спектра связанных электронов. Дифференциальные уравнения. 1991, т. 27, № 7, с. 1237-1245.

Поступила в редакцию
26.12.94