

На правах рукописи

ОВЕЧКИН Антон Александрович

Расчёты уравнений состояния и непрозрачностей по модели Либермана

Специальность 05.13.18

«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Автореферат диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва 2012

Актуальность работы. Для моделирования различных плазменных процессов требуется знание теплофизических свойств веществ в различных условиях, в том числе при экстремально высоких давлениях и температурах [1]. Для повышения достоверности математического моделирования газодинамических и радиационных процессов в плазме важно, чтобы уравнения состояния, коэффициенты поглощения фотонов (непрозрачности) и транспортные коэффициенты (теплопроводность, электропроводность, вязкость), входящие в систему уравнений радиационной газовой динамики, были согласованы друг с другом, т.е. вычислены на основе единого теоретического подхода. Кроме того, численное моделирование предъявляет ряд требований к качеству уравнений состояния, в частности, давление и внутренняя энергия должны быть достаточно плавными функциями температуры и плотности вещества и удовлетворять различным термодинамическим тождествам и неравенствам.

Сравнение результатов расчётов по различным моделям вещества необходимо для более глубокого понимания роли моделируемых физических процессов и явлений, установления областей применимости и дальнейшего совершенствования теоретических моделей.

Ячеечные модели среднего атома [2] часто используются как основа для построения широкодиапазонных уравнений состояния. В диапазоне температур и плотностей вещества, в котором модели среднего атома не обеспечивают достаточную точность, они обычно заменяются полуэмпирическими моделями, а в последнее время часто используются результаты расчётов методом молекулярной динамики.

Учёт промежуточных состояний между связанными состояниями, локализованными в пределах атомной ячейки (ячейки Вигнера-Зейтца), и состояниями непрерывного спектра с высокой энергией, для которых применимо квазиклассическое приближение, наиболее сложен в моделях среднего атома как в смысле их теоретического описания, так и с вычислительной точки зрения. Способы учёта таких состояний зависят от постановки граничных условий. В квазизонной модели [3–5] и в модели Рошнаи [6, 7] к состояниям промежуточного типа относятся состояния электронов в разрешённых энергетических зонах (такие зоны возникают при постановке граничных условий для волновых функций электронов на границе атомной ячейки). В модели Либермана [8] аналогичную роль играют резонансы плотности состояний в непрерывном спектре. Детальный учёт промежуточных состояний необходим для корректного описания ионизации давлением — разрушения внешних электронных оболочек и выдавливания дискретных уровней энергии в непрерывный спектр вследствие взаимодействия атомов в сжатом веществе.

Как известно [9], при ионизации давлением не происходит резких изменений самосогласованного потенциала, электронной плотности, термодинамических или оптических величин. Но для получения плавных зависимостей всех величин среднего атома от плотности и температуры вещества необходим достаточно полный и последовательный учёт промежуточных состояний, что требует применения специальных вычислительных методов, учитывающих физические особенности решаемой задачи.

В простейшей ячеечной модели — модели Томаса-Ферми [10] — все состояния электронов учитываются в квазиклассическом приближении и относятся к непрерывному спектру, который можно рассматривать как совокупность широких перекрывающихся энергетических зон [11]. Поэтому модель Томаса-Ферми верно передаёт асимптотики термодинамических величин при высоких плотностях вещества и до сих пор широко используется на практике. При использовании более сложных квантово-статистических моделей, таких как модель Либермана или квазизонная модель, модель Томаса-Ферми может служить для получения начального приближения для самосогласованного потенциала электронов в атоме и полезна при анализе асимптотик этих моделей в области сжатого вещества. Основными недостатками модели Томаса-Ферми являются неучёт оболочечной структуры электронной плотности и неучёт обменных эффектов. Современные квантово-статистические модели расширяют область применимости ячеечных моделей по сравнению с моделью Томаса-Ферми и её модификациями [12].

Самосогласованный потенциал и волновые функции электронов в среднем атоме могут служить основой для применения как статистических, так и детальных методик расчёта сечений поглощения фотонов в плотной высокотемпературной плазме.

Модель Либермана широко применяется для моделирования теплофизических свойств веществ в научно-исследовательских центрах США, Франции, Израиля, Великобритании, ведущих исследования по физике высоких плотностей энергии, но до последнего времени в соответствующих российских научно-исследовательских институтах реализаций этой модели не существовало.

Основными **целями диссертации** являются разработка численной методики расчёта уравнений состояния и коэффициентов поглощения фотонов на основе модели Либермана, проведение сравнительных расчётов и анализ их результатов для выяснения области применимости модели Либермана, её преимуществ и недостатков по сравнению с другими моделями вещества.

Практическая ценность работы состоит в создании программы RESEOS, предназначенной для расчётов термодинамических, оптических и транспортных свойств плазмы в состоянии локального термодинамического равновесия на основе современной квантово-статистической модели Либермана и име-

ющей возможность распараллеливания; в верификации этой программы на многочисленных сравнительных расчётах с данными других авторов (теоретическими и экспериментальными), подтвердивших надёжность программы и достоверность получаемых с её помощью результатов. Это позволяет использовать программу RESEOS для расчёта таблиц теплофизических свойств веществ с целью дальнейшего их применения в газодинамических программах.

Научная новизна работы состоит в разработке и реализации оригинальных алгоритмов расчёта самосогласованного потенциала и спектральных коэффициентов поглощения фотонов с учётом резонансов плотности состояний в непрерывном спектре; в обобщении суперконfigurационного подхода путём эффективного учёта флуктуаций чисел заполнения части атомных подоболочек и в предложенном способе усреднения лоренцевских ширин при вычислении параметров профиля массива спектральных линий, отвечающего заданной суперконfigurации.

Основные положения, выносимые автором на защиту.

1. Реализована и исследована модель Либермана с описанием резонансов плотности состояний в непрерывном спектре, позволяющая получать плавные зависимости термодинамических и оптических величин от плотности и температуры вещества.

2. Разработаны эффективные алгоритмы учёта резонансных состояний и получены термодинамически согласованные уравнения состояния электронной компоненты различных веществ путём численного интегрирования энтропии по температуре и дифференцирования по плотности вещества.

3. Разработан и реализован оригинальный вариант суперконfigurационного подхода для расчёта сечений поглощения фотонов в спектральных линиях.

4. Разработана программа RESEOS и проведены систематические расчёты теплофизических свойств различных веществ. Проведённая верификация программы позволяет использовать её для получения данных по свойствам веществ с целью их дальнейшего применения в задачах физики высоких плотностей энергии.

Публикации и апробация работы.

Основные результаты исследований, проведённых совместно с соавторами, изложены в журнальных статьях [13, 14], препринтах ИПМ им. М.В. Келдыша РАН [15–18] и сборниках трудов конференций [19–22], докладывались на XXIV Международной конференции «Взаимодействие мощных потоков энергии с веществом» (Эльбрус, 2009 г.), Научно-координационном совещании «Исследования неидеальной плазмы» (Москва, ОИВТ РАН, 2009 и 2010 гг.), Научной сессии МИФИ (Москва, 2010 г.), XIII Харитоновских научных

чтениях (Саров, 2011 г.), XI Забабахинских научных чтения (Снежинск, 2012 г.) и XIV Международной конференции по физике неидеальной плазмы (Росток, 2012 г.).

Основное содержание диссертации.

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и двух приложений.

В *главе 1* приведены уравнения модели Либермана и рассмотрены основные свойства резонансов плотности состояний и численный метод учёта резонансов, реализованный в программе RESEOS [13].

Модель Либермана относится к ячеечным моделям вещества. Применение вариационного принципа — требования минимума большого термодинамического потенциала системы, состоящей из электронейтральной сферической атомной ячейки, содержащей центральное точечное ядро с зарядом Z (в ат. ед.) и Z электронов, и окружающих ячейку равномерно распределённых положительных и отрицательных зарядов, играющих роль внешних ионов и свободных электронов, приводит [8] к одноэлектронному уравнению Дирака (в данной работе реализован релятивистский вариант модели Либермана):

$$\begin{cases} F'_{\varepsilon lj}(r) + \frac{\varkappa}{r} F_{\varepsilon lj}(r) = \alpha \left(\varepsilon + V(r) + \frac{2}{\alpha^2} \right) G_{\varepsilon lj}(r), \\ G'_{\varepsilon lj}(r) - \frac{\varkappa}{r} G_{\varepsilon lj}(r) = -\alpha (\varepsilon + V(r)) F_{\varepsilon lj}(r). \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\frac{F_{\varepsilon lj}(r)}{r}$ и $\frac{G_{\varepsilon lj}(r)}{r}$ — большая и малая радиальные компоненты волновой функции состояния с энергией ε , орбитальным квантовым числом l и квантовым числом полного момента j ; $\varkappa = (l - j)(2j + 1)$; α — постоянная тонкой структуры. Граничные условия для волновых функций электронов в модели Либермана ставятся на бесконечности, и все состояния электронов делятся на состояния дискретного и непрерывного спектра. Для нахождения дискретных уровней энергии используется фазовый метод [2].

Потенциал $V(r)$ в (1) определяется пространственным распределением электронной плотности, для вычисления которой нужно знать волновые функции и числа заполнения электронных состояний, связанные со значениями энергий этих состояний статистикой Ферми-Дирака. А так как сами волновые функции и уровни энергии находятся путем решения уравнения Дирака, то задача является самосогласованной и решается методом итераций. Электронейтральность атомной ячейки на каждой итерации обеспечивается выбором химического потенциала.

Ввиду большого объёма вычислений программа RESEOS реализована как в однопроцессорном, так и в многопроцессорном вариантах. Распараллеливание в многопроцессорной версии проводится по значениям температуры и

плотности вещества с использованием технологии MPI [23]. Реализован счёт с продолжением: после каждой итерации промежуточные результаты сохраняются, поэтому расчёт можно прерывать, когда итерации для текущего значения температуры и плотности ещё не завершились; при возобновлении расчёт начинается с той итерации, на которой он был прерван. Головная часть программного комплекса RESEOS, содержащая все обращения к процедурам MPI, но не содержащая процедур, специфических для модели Либермана, в основном заимствована из комплекса TH_BAND [5], в котором реализована квазизонная модель.

Резонансы в модели Либермана представляют собой резкие и узкие максимумы плотности состояний, определяемой как интеграл от квадрата волновой функции состояния непрерывного спектра по объёму атомной ячейки:

$$w_{lj}(\varepsilon) = \int_0^{r_0} (F_{\varepsilon lj}^2(r) + G_{\varepsilon lj}^2(r)) dr \quad (2)$$

($r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n_i}\right)^{\frac{1}{3}}$ — радиус ячейки, n_i — концентрация ядер). Резонансы появляются при исчезновении дискретных уровней энергии, которое происходит при увеличении плотности или понижении температуры вещества. Роль резонансов наиболее велика при высоких плотностях и низких температурах, когда они могут быть заселены большим количеством электронов. Сразу после своего появления резонанс всегда очень узок и напоминает дискретный уровень энергии. Аккуратный учёт резонансов требует использования адаптивных сеток по энергии электронов в непрерывном спектре, для построения которых нужно заранее определять область энергий, в которой находится резонанс. Для локализации резонансов в данной работе используется следующая особенность поведения радиальных волновых функций электронов непрерывного спектра (рис. 1): при энергиях ниже резонансной энергии волновая функция в двух последовательных максимумах имеет одинаковые знаки, а при энергиях выше резонансной в тех же по счёту максимумах волновая функция имеет противоположные знаки. Кроме того, в данной работе в области резонанса делается замена переменных, с тем чтобы при интегрировании плотности состояний подынтегральная функция плавно зависела от переменной интегрирования.

Указанная особенность поведения волновой функции означает, что фаза волновой функции в области резонанса резко изменяется примерно на величину π . При этом фаза φ_0 волновой функции непрерывного спектра опреде-

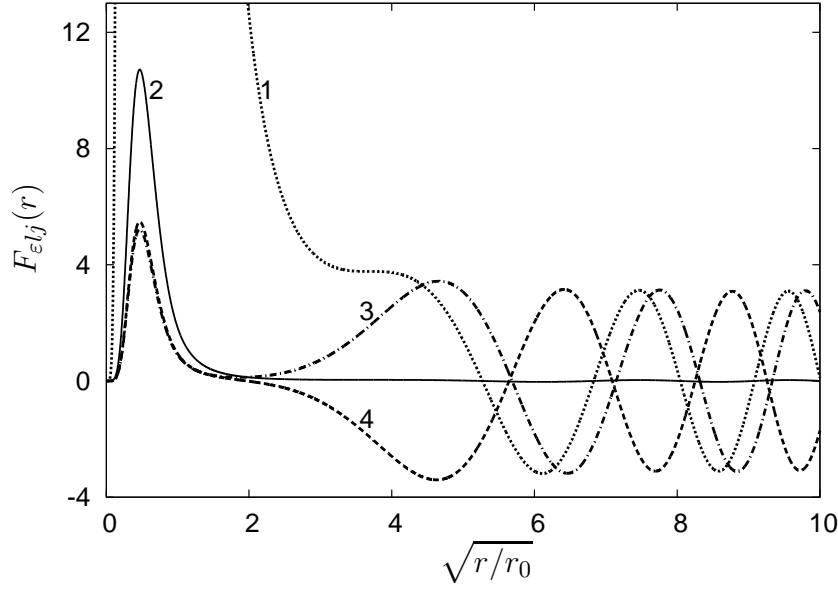


Рис. 1. Большие радиальные компоненты волновых функций непрерывного спектра с $l = 2$, $j = 2.5$ и различными значениями энергий в области резонанса: 1) — с энергией $\epsilon_c = 6.15 \cdot 10^{-2}$ эВ, 2) — то же, но волновая функция уменьшена в 100 раз, 3) $\epsilon = 6.05 \cdot 10^{-2}$ эВ ($\epsilon < \epsilon_c$), 4) $\epsilon = 6.25 \cdot 10^{-2}$ эВ ($\epsilon > \epsilon_c$). Расчёт проведён для меди при температуре $T = 7.45$ эВ и плотности $\rho = 8.92$ г/см³

ляется её асимптотикой на больших расстояниях —

$$F_{\epsilon l j}(r) \simeq \sqrt{\frac{p}{\pi \epsilon}} \sin\left(pr - \frac{l\pi}{2} + \varphi_0\right), \quad p = \sqrt{\epsilon(2 + \alpha^2 \epsilon)} \quad (3)$$

— и зависит от вида потенциала. На рис. 2 приведены профиль резонанса, возникающего в меди при выдавливании в непрерывный спектр подболочки $3d_{\frac{5}{2}}$, и фаза волновой функции в области резонанса. Для резонансов с $l = 0$, в отличие от резонансов с $l \neq 0$, величина изменения фазы составляет $\frac{\pi}{2}$, причём фаза убывает на $\frac{\pi}{2}$, если резонанс существует незадолго до исчезновения дискретного уровня, и возрастает на $\frac{\pi}{2}$ после исчезновения дискретного уровня.

Узкие и высокие резонансы дают примерно такой же вклад в плотность состояний и электронную плотность, как и дискретные уровни, при исчезновении которых они возникают. Поэтому, несмотря на то, что вклады электронов дискретного и непрерывного спектра в плотность электронов и термодинамические величины при исчезновении дискретных уровней могут по отдельности сильно изменяться, суммарные величины остаются почти неизменными (см. рис. 3).

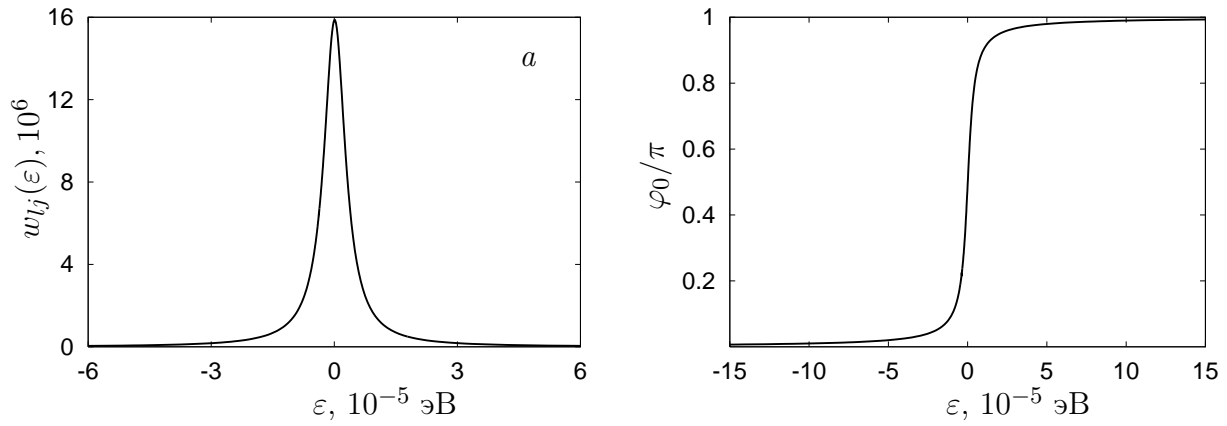


Рис. 2. Плотность состояний $w_{lj}(\varepsilon)$ (а) и фаза волновой функции φ_0 (б) для $l = 2$, $j = 2.5$ в области резонанса (энергия на графике отсчитывается от точки максимума плотности состояний). Расчёт проведён для меди при $T = 7.45$ эВ, $\rho = 8.92$ г/см³

При увеличении плотности или понижении температуры вещества узкие резонансы уширяются и постепенно растворяются в непрерывном спектре.

В *главе 2* рассмотрены различные способы вычисления термодинамических величин в модели Либермана.

Условия, накладываемые при формулировке модели Либермана (электронейтральность ячейки Вигнера-Зейтца, постоянство плотности зарядов вне ячейки, способ разделения состояний электронов на состояния атома и окружающего его фона внешних зарядов) приводят к тому, что вариационный принцип и, как следствие, термодинамические тождества, удовлетворяются лишь приближённо, т.е. исходные формулы модели Либермана для внутренней энергии, давления и энтропии термодинамически не согласованы [17, 24, 25]. Термодинамически согласованное уравнение состояния можно получать численным дифференцированием свободной энергии Гельмгольца по плотности и температуре вещества:

$$P_e(\rho, T) = \rho^2 \frac{\partial F_e(\rho, T)}{\partial \rho}, \quad (4)$$

$$E_e(\rho, T) = F_e(\rho, T) - T \frac{\partial F_e(\rho, T)}{\partial T}. \quad (5)$$

Здесь F_e , E_e и P_e — соответственно удельная свободная энергия, удельная внутренняя энергия и давление электронов. В данной работе используется предложенный в [26] подход, в котором при построении уравнения состояния за основу берутся значения энтропии электронов, рассчитанной по формулам модели Либермана, а тепловая составляющая свободной энергии вычисляется

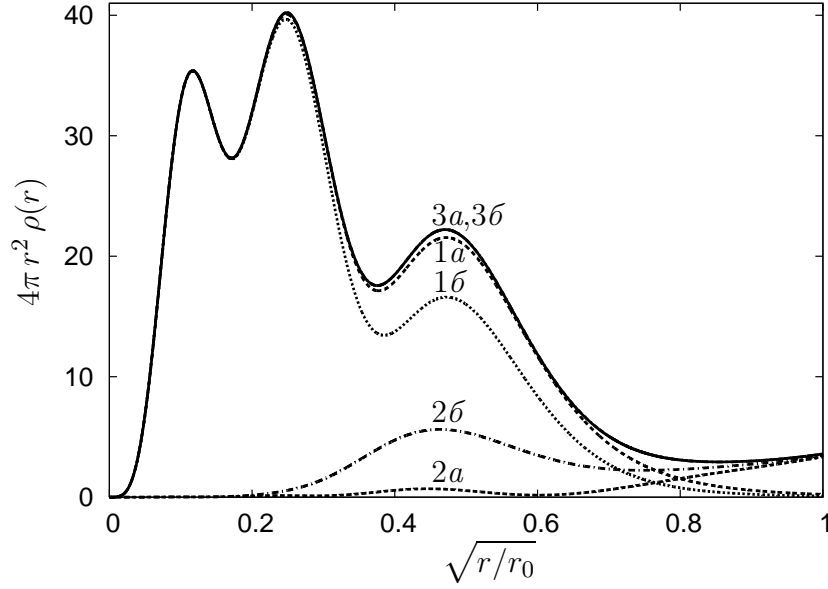


Рис. 3. Радиальная электронная плотность для меди при плотности $\rho = 8.92$ г/см³ и при двух значениях температуры. С индексом *a* — при $T = 7.6$ эВ, с индексом *б* — при $T = 7.45$ эВ: 1*a*, 1*б* — плотность электронов дискретного спектра, 2*a*, 2*б* — плотность электронов непрерывного спектра, 3*a*, 3*б* — суммарная плотность (кривые практически совпадают)

численным интегрированием энтропии по температуре:

$$F_{e,th}(\rho, T) \equiv F_e(\rho, T) - F_e(\rho, T = 0) = - \int_0^T S_e(\rho, T') dT', \quad (6)$$

после чего тепловые электронные компоненты давления $P_{e,th}(\rho, T) \equiv P_e(\rho, T) - P_e(\rho, T = 0)$ и внутренней энергии $E_{e,th}(\rho, T) \equiv E_e(\rho, T) - E_e(\rho, T = 0)$ находятся по формулам (4), (5) с заменой $F_e(\rho, T)$ на $F_{e,th}(\rho, T)$.

Так как расчётная холодная кривая (зависимости $E_e(\rho, T = 0)$ и $P_e(\rho, T = 0)$) в модели Либермана недостаточно точно описывает экспериментальные значения нормальной плотности, скорости звука и энергии сублимации, то обычно при построении широкодиапазонных уравнений состояния на основе модели Либермана используют полуэмпирические холодные кривые или холодные кривые, рассчитанные методом молекулярной динамики. В данной работе для построения холодной кривой при плотностях вещества больших плотности твёрдого тела при нормальных условиях ρ_0 используется уравнение состояния Г.М. Елисеева и Г.Е. Клинишова [27], а при $\rho < \rho_0$ — уравнение состояния А.Т. Сапожникова и А.В. Першиной [28].

Ионные компоненты давления и внутренней энергии в данной работе вычисляются двумя способами — по модели заряженных твёрдых сфер [2] и в приближении идеального газа.

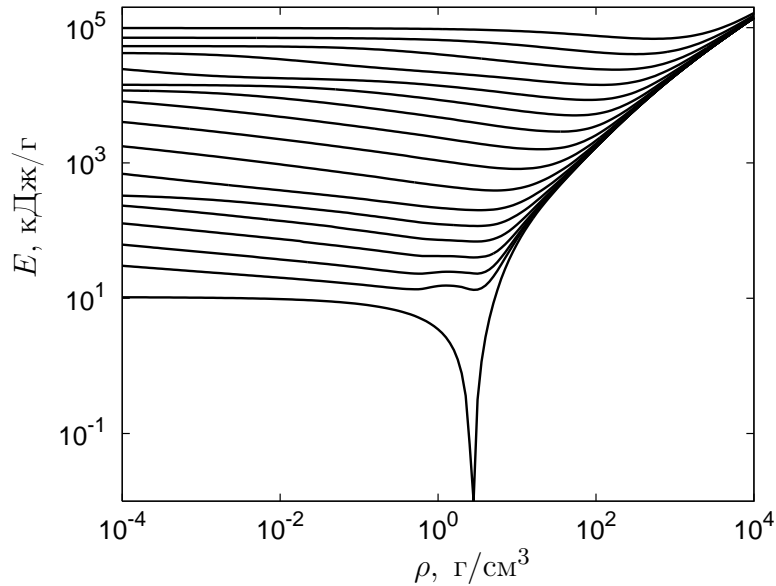


Рис. 4. Изотермы внутренней энергии для алюминия при $T = 0$ и в интервале температур $T = 1$ эВ — 1 кэВ с шагом $\Delta \lg T = 0.2$, рассчитанные по программе RESEOS

На рис. 4, 5 приведены изотермы внутренней энергии и давления в алюминии, рассчитанные по программе RESEOS, а на рис. 6 ударные адиабаты алюминия, полученные по программам RESEOS и Purgatorio¹ [29], сравниваются с экспериментальными данными [30].

В *главе 3* рассматривается применение модели Либермана для расчётов коэффициентов поглощения фотонов в плазме в состоянии локального термодинамического равновесия.

В плотной плазме тяжёлых элементов реализуется очень большое число состояний ионов и, как следствие, большое число спектральных линий, отвечающих переходам ионов между состояниями с различными энергиями при поглощении фотонов. Явный учёт всех спектральных линий может оказаться слишком трудоёмким и в то же время практически бессмысленным, так как отдельные линии в плотной плазме перекрываются, образуя сплошные массивы линий. В этом случае хорошо работают статистические методы, в которых совокупность близко расположенных спектральных линий заменяется плавной огибающей, имеющей такие же первые моменты распределения по энергиям фотонов.

Учёт эффекта Доплера, а также радиационной и столкновительной релаксации возбуждённых состояний ионов приводит к тому, что профиль отдельной спектральной линии приближённо описывается функцией Фойгта

¹Программа Purgatorio представляет собой одну из реализаций модели Либермана.

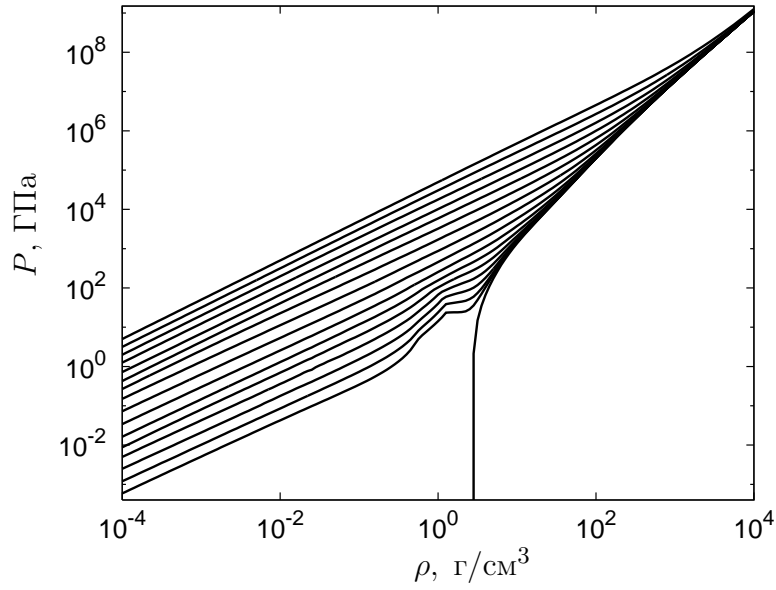


Рис. 5. Изотермы давления для алюминия при $T = 0$ и в интервале температур $T = 1$ эВ — 1 кэВ с шагом $\Delta \lg T = 0.2$, рассчитанные по программе RESEOS

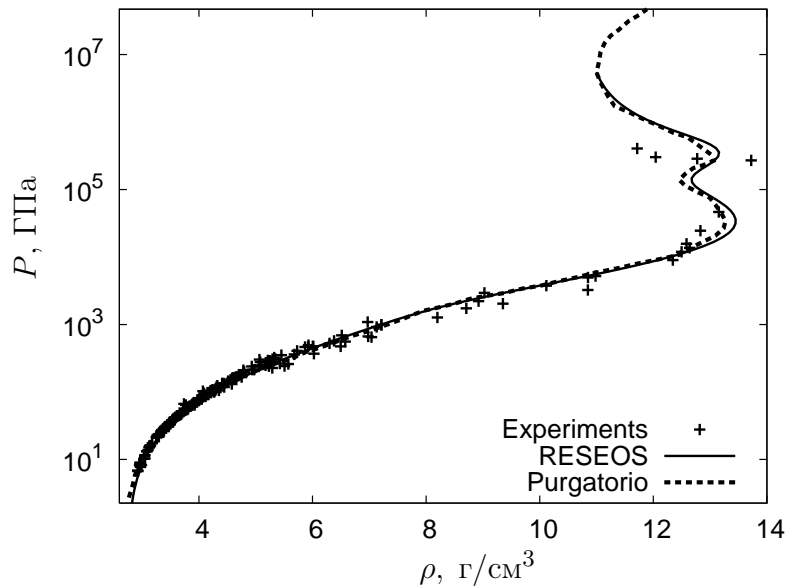


Рис. 6. Ударные адиабаты алюминия, полученные по программе RESEOS (сплошная кривая) и по программе Purgatorio [29] (штриховая кривая), и экспериментальные данные [30]. Вклад ионов учтён в приближении идеального газа

(см. [2]):

$$\sigma_{AB}(\omega) \sim \frac{f_{AB}}{\sqrt{\pi} D_{AB}} K \left(\frac{\omega - \varepsilon_{AB}}{D_{AB}}, \frac{\gamma_{AB}}{D_{AB}} \right). \quad (7)$$

Здесь $\sigma_{AB}(\omega)$ — сечение поглощения фотона с энергией ω для перехода иона из состояния A в состояние B , f_{AB} и ε_{AB} — соответственно сила осциллятора и положение центра линии для данного перехода, γ_{AB} — лоренцевская ширина для перехода $A \rightarrow B$, равная сумме радиационной и столкновительной ширин, $D_{AB} = \frac{\omega_{AB}}{c} \sqrt{\frac{T}{M_i}}$ — параметр доплеровского уширения (M_i — масса иона, c — скорость света). При использовании статистических методов сечение поглощения по-прежнему описывается функцией Фойгта, но с другими параметрами:

$$\sigma(\omega) \sim \frac{f}{\sqrt{\pi} \delta} K \left(\frac{\omega - E}{\delta}, \frac{\gamma}{\delta} \right). \quad (8)$$

Здесь $\delta = \sqrt{D^2 + 2\Delta}$; f , γ и D — усреднённые значения силы осциллятора и лоренцевской и доплеровской ширин,

$$E = \left(\int \sum_{AB} \sigma_{AB}(\omega) \omega d\omega \right) \cdot \left(\int \sum_{AB} \sigma_{AB}(\omega) d\omega \right)^{-1}, \quad (9)$$

$$\Delta = \left(\int \sum_{AB} \sigma_{AB}(\omega) (\omega - E)^2 d\omega \right) \cdot \left(\int \sum_{AB} \sigma_{AB}(\omega) d\omega \right)^{-1}, \quad (10)$$

причём при вычислении интегралов в (10) функция Фойгта $K(x, y)$ формально заменяется на $\sqrt{\pi} \delta(x)$.

В данной работе используется суперконфигурационный подход [31, 32], в котором усредняется сечение поглощения для группы линий, отвечающих заданному переходу электрона с подболочки $\alpha = nlj$ на подболочку $\beta = n'l'j'$ (начальное и конечное состояния иона отличаются положением одного электрона) и заданным начальной и конечной суперконфигурациям. Под суперконфигурацией понимают совокупность электронных конфигураций с близкими средними энергиями (конфигурация определяется фиксированными числами заполнения подболочек). Обычно в суперконфигурацию объединяют конфигурации, отвечающие фиксированным числам заполнения супероболочек — совокупностей электронных подболочек с близкими энергиями. В [31, 32] получены выражения для положения центра $E_{\alpha\beta}^{\Xi}$ и дисперсии $\Delta_{\alpha\beta}^{\Xi}$ линии, отвечающей заданной начальной суперконфигурации Ξ (конечная суперконфигурация однозначно определяется по известным начальной суперконфигурации и одноэлектронному переходу $\alpha \rightarrow \beta$). Величины $E_{\alpha\beta}^{\Xi}$ и

$\Delta_{\alpha\beta}^{\Xi}$ выражаются через статсуммы супероболочек, для которых в [31, 33] получены рекуррентные формулы, и содержат независимые вклады от каждой супероболочки σ :

$$E_{\alpha\beta}^{\Xi} = D_0 + \sum_{\sigma} \varepsilon_{\alpha\beta}^{\sigma}, \quad (11)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^{\Xi} = \sum_{\sigma} \Delta_{\alpha\beta}^{\sigma}. \quad (12)$$

Здесь

$$D_0 = I_{\beta} - I_{\alpha}, \quad (13)$$

$$I_s = \varepsilon_s + \int_0^{r_0} \left(V(r) - \frac{Z}{r} \right) (F_s^2(r) + G_s^2(r)) dr, \quad (14)$$

ε_s — энергия подоболочки s . Величина $\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma}$ содержит вклад $\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma(fl)}$, связанный с флуктуациями чисел заполнения подоболочек (при фиксированном числе заполнения супероболочки электроны могут по-разному распределяться между входящими в её состав подоболочками), и вклад $\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma(m)}$, связанный с мультиплетным расщеплением уровней энергии иона. Учёт мультиплетного расщепления приводит также [32] к появлению дополнительного слагаемого в выражениях для величин

$$D_r = H_{r\beta} - H_{r\alpha} \quad (15)$$

(H_{rs} — матричный элемент парного взаимодействия электронов (см. [2, 31])), входящих в формулы для $\varepsilon_{\alpha\beta}^{\sigma}$ и $\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma}$, но в данной работе этот эффект не учитывается.

В [31] показано, что если сечение поглощения для перехода $\alpha \rightarrow \beta$ усредняется по всем конфигурациям без ограничения на числа заполнения супероболочек, то это эквивалентно эффективному учёту флуктуаций чисел заполнения подоболочек, предложенному в [34, 35]. Формулы для параметров спектрального профиля в приближении эффективной методики имеют вид [31, 32, 34, 35]:

$$E_{\alpha\beta} = D_0 + \sum_r g_r^{\alpha\beta} n_r D_r, \quad (16)$$

$$\Delta_{\alpha\beta} = \sum_r g_r^{\alpha\beta} n_r (1 - n_r) (D_r^2 + \Delta_{\alpha r \rightarrow \beta r}^2). \quad (17)$$

Здесь

$$g_r = 2j_r + 1, \quad g_r^{\alpha\beta} = g_r - \delta_{r\alpha} - \delta_{r\beta}, \quad n_r \equiv n(\varepsilon_r) = \left(1 + \exp \left(\frac{\varepsilon_r - \mu}{T} \right) \right)^{-1},$$

где ε_r — энергия подболочки r , μ — химический потенциал, $\Delta_{\alpha r \rightarrow \beta r}^2$ — дисперсия, связанная с мультиплетной структурой уровней энергии, для двухэлектронной конфигурации (см. [2,32]). При этом суммирование в (16), (17) ведётся по всем подболочкам. Отметим, что при больших плотностях вещества сечения поглощения асимптотически выходят на приближение эффективной методики.

В [36] показано, что эффективный учёт флуктуаций чисел заполнения подболочек, удовлетворяющих условию

$$n_r (1 - n_r) \ll 1, \quad (18)$$

т.е. почти полностью заполненных или почти не заполненных, не сказывается существенно на точности описания спектра, но позволяет уменьшить число учитываемых массивов спектральных линий и тем самым сократить время счёта. В [36] все подболочки разбиваются на две группы: для первой группы числа заполнения подболочек перебираются явно, а для второй группы флуктуации чисел заполнения учитываются эффективно. Обе группы дают независимые вклады в параметры спектрального профиля (при этом вклад во флуктуационную ширину от подболочек, числа заполнения которых перебираются явно, отсутствует). В диссертации вводится обобщение понятия суперконфигурации [31] на основе предложенного в [36] подхода, а именно: супероболочки группируются только из подболочек, не удовлетворяющих условию (18), а суперконфигурация объединяет все конфигурации, отвечающие супероболочкам с фиксированными числами заполнения и всем подболочкам, не вошедшим в состав супероболочек, с произвольными числами заполнения. При этом супероболочки и подболочки, на включённые в супероболочки, дают независимые вклады в выражения для параметров спектрального профиля:

$$E_{\alpha\beta}^{\Xi} = D_0 + \sum_{\sigma} \varepsilon_{\alpha\beta}^{\sigma} + \sum_{r \not\subseteq \{\sigma\}} g_r^{\alpha\beta} n_r D_r, \quad (19)$$

$$\Delta_{\alpha\beta}^{\Xi} = \sum_{\sigma} \Delta_{\alpha\beta}^{\sigma} + \sum_{r \not\subseteq \{\sigma\}} g_r^{\alpha\beta} n_r (1 - n_r) (D_r^2 + \Delta_{\alpha r \rightarrow \beta r}^2). \quad (20)$$

Символом $\{\sigma\}$ здесь обозначена совокупность супероболочек. Величины $\varepsilon_{\alpha\beta}^{\sigma}$, $\Delta_{\alpha\beta}^{\sigma}$ в (19), (20) совпадают с аналогичными величинами в (11), (12). Формулы (19), (20) реализованы в программе RESEOS.

В диссертации предложен способ усреднения лоренцевских ширин линий, основанный на приближённом совпадении среднего сечения поглощения (8) с суммой сечений поглощения вида (7) в далёком крыле спектрального рас-

пределения, т.е. при $|\omega - E_{\alpha\beta}^{\Xi}| \gg \sqrt{D_{\alpha\beta}^2 + 2\Delta_{\alpha\beta}^{\Xi}}$, что даёт

$$\gamma_{\alpha\beta}^{\Xi} = \left(\sum_{C \in \Xi} P_C q_{\alpha} \left(1 - \frac{q_{\beta}}{g_{\beta}} \right) \gamma_{\alpha\beta}^C \right) \cdot \left(\sum_{C \in \Xi} P_C q_{\alpha} \left(1 - \frac{q_{\beta}}{g_{\beta}} \right) \right)^{-1}, \quad (21)$$

где $\gamma_{\alpha\beta}^C$ и $\gamma_{\alpha\beta}^{\Xi}$ — лоренцевские ширины массивов линий, отвечающих соответственно конфигурации C и суперконфигурации Ξ , P_C — вероятность реализации конфигурации C , q_{α} и q_{β} — числа заполнения подболочек α и β в конфигурации C . Формула (21) реализована в программе RESEOS в приближении эффективной методики (суперконфигурация Ξ содержит все возможные конфигурации).

Формулы (19), (20) обобщены в программе RESEOS на случай эффективного учёта флуктуаций числа электронов в резонансах (суммирование по r в (19), (20) дополняется интегрированием по энергии по областям резонансов, при этом в (20) волновые функции непрерывного спектра в резонансах нормируются таким образом, чтобы обеспечить плавное изменение параметров профиля при выдавливании дискретных подболочек в непрерывный спектр). По аналогии с поглощением в линиях спектральный профиль строится и для сечения фотоионизации, отвечающего переходам электронов из дискретного в непрерывный спектр:

$$\sigma_{bf}^{\alpha}(\omega) \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} d\varepsilon (1 - n(\varepsilon)) \frac{f_{\alpha\varepsilon}}{\delta(\varepsilon)} \exp \left(- \left(\frac{\omega - (\varepsilon - \varepsilon_{\alpha}) - E_1(\varepsilon)}{\delta(\varepsilon)} \right)^2 \right) \quad (22)$$

($\sigma_{bf}^{\alpha}(\omega)$ — сечение фотоионизации для переходов электронов с подболочки α , ε_{α} — энергия подболочки α). Волновые функции конечных состояний электронов в непрерывном спектре при вычислении параметров профиля $E_1(\varepsilon) \equiv E(\varepsilon) - (\varepsilon - \varepsilon_{\alpha})$ и $\delta(\varepsilon)$ нормируются на единицу в объёме ячейки, как и волновые функции сильносвязанных состояний дискретного спектра. Сечение фотоионизации, таким образом, рассматривается как совокупность бесконечного числа «линий», каждая из которых имеет собственные значения смещения и дисперсии (т.е. параметры спектрального профиля $E_1(\varepsilon)$ и $\delta(\varepsilon)$ зависят от энергии электрона в непрерывном спектре). Такое статистическое описание процессов фотоионизации [37] вводится в данной работе искусственно, чтобы обеспечить плавный переход сечения поглощения в линиях в сечение фотоионизации при исчезновении дискретных подболочек.

Сечение тормозного поглощения, отвечающее переходам электронов между состояниями непрерывного спектра, при низких энергиях электронов вычисляется с использованием численных волновых функций, а при достаточно

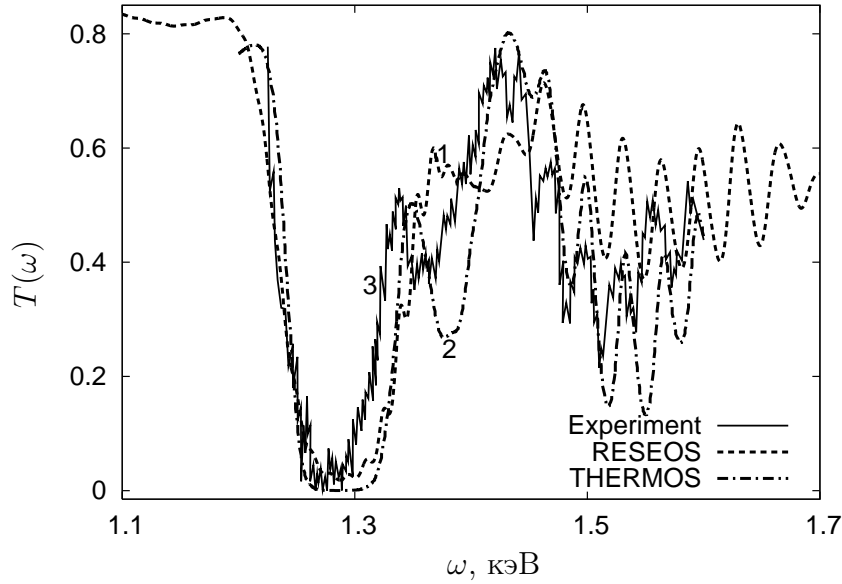


Рис. 7. Коэффициент прохождения в плазме германия при $T = 76$ эВ, $\rho = 0.05$ г/см³, полученный по программам RESEOS (1) и THERMOS (2), и экспериментальные данные [39] (3). Толщина слоя плазмы $L = 3.2 \cdot 10^{-3}$ см

высоких энергиях начального и конечного состояний электрона используется приближение Крамерса с учётом вырождения (см. [2]).

На рис. 7 коэффициенты прохождения

$$T(\omega) = e^{-\rho L \chi(\omega)} \quad (23)$$

($\chi(\omega) = \frac{\sigma(\omega)(1 - e^{-\frac{\omega}{T}})}{M_i}$ — коэффициент поглощения, L — толщина слоя плазмы) в плазме германия, вычисленные по программам RESEOS и THERMOS² [2, 38], сравниваются с экспериментальными данными [39]. По-видимому, основной причиной расхождений результатов расчётов по двум программам является использование в программе RESEOS биномиального распределения, а в программе THERMOS — распределения Гиббса для вероятностей реализации электронных конфигураций.

На рис. 8 спектральный коэффициент поглощения в твердотельной меди при $T = 0.1$ эВ, полученный по программе RESEOS, сравнивается с данными [40] и [41], представляющими собой сочетание различных экспериментальных и расчётно-теоретических результатов. Расхождения кривых наблюдаются в основном при низких энергиях фотонов ($\sim 10 - 100$ эВ), при которых данные [40] и [41] могут быть не вполне достоверными. В целом же все спектральные коэффициенты поглощения на рис. 8 хорошо согласуются между собой.

²В программе THERMOS реализована модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера [4].

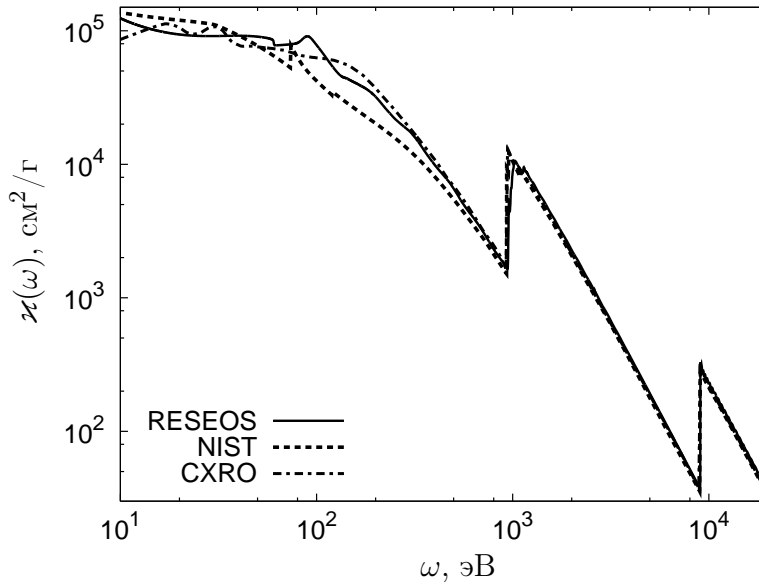


Рис. 8. Спектральный коэффициент поглощения в меди при $\rho = 8.9 \text{ г/см}^3$: сплошная кривая — расчёт по программе RESEOS (при $T = 0.1 \text{ эВ}$), штриховая кривая — данные [40], штрих-пунктир — данные [41]

На рис. 9 приведены изотермы росселандовых коэффициентов поглощения в алюминии, рассчитанных по программам RESEOS и THERMOS. Видно, что росселандовы коэффициенты поглощения, рассчитанные по программе RESEOS, более плавно зависят от плотности вещества.

Выводы по проделанной работе.

Создана программа RESEOS для расчётов теплофизических свойств веществ в широком диапазоне температур и плотностей на основе релятивистского варианта модели Либермана [8]. Программа реализована как в однопроцессорном, так и в многопроцессорном вариантах.

Знание особенностей поведения волновых функций непрерывного спектра в области резонанса плотности состояний позволило построить эффективные и надёжные алгоритмы учёта резонансных состояний, что необходимо для корректного описания ионизации давлением. Роль резонансов плотности состояний в модели Либермана при описании ионизации давлением качественно аналогична роли разрешённых энергетических зон в квазизонной модели [3–5] и в модели Рошнаи [6, 7].

Проведены систематические расчёты уравнений состояния, коэффициентов поглощения фотонов и электропроводности для ряда элементов. Результаты расчётов в целом хорошо согласуются с результатами, полученными с помощью других реализаций модели Либермана и по другим современным моделям вещества, а также с экспериментальными данными.

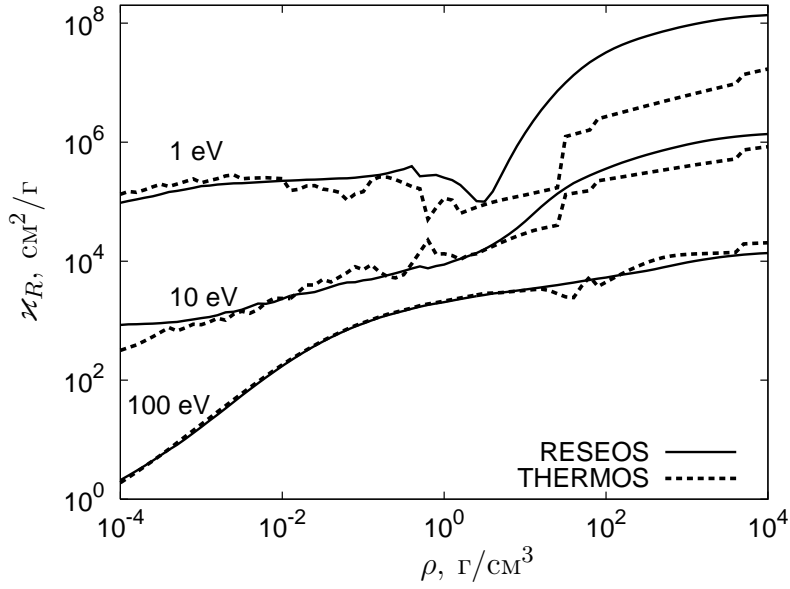


Рис. 9. Изотермы росселандова коэффициента поглощения в алюминии при $T = 1, 10, 100$ эВ, полученные по программам RESEOS (сплошные линии) и THERMOS (штриховые линии)

Замена холодных кривых, рассчитанных по модели Либермана, на полуэмпирические холодные кривые, применявшаяся в [26, 29], в целом улучшает согласие с экспериментом при плотностях выше нормальной плотности вещества ρ_0 . В частности, ударные адиабаты сплошных веществ хорошо описываются на всём их протяжении.

Проведены расчёты тепловой части термодинамически согласованного уравнения состояния электронов в широком диапазоне температур и плотностей веществ методом, предложенным в [26] — путём численного интегрирования энтропии электронов по температуре и дифференцирования по плотности. Преимущества этого метода состоят в его устойчивости по отношению к ошибкам вычисления энтропии и в том, что требования к точности вычисления самосогласованного потенциала и энергетического спектра электронов при расчёте энтропии относительно невысоки (ниже, чем при расчёте внутренней энергии).

Особенности поведения энтропии в модели Либермана при низких температурах и плотностях ниже нормальной плотности (в частности, при $T = 0$ энтропия не обращается в ноль вследствие вырожденности основного состояния среднего атома в модели Либермана) могут приводить к нефизическим зависимостям внутренней энергии и давления от плотности и температуры при $\rho \lesssim \rho_0, T \lesssim 1$ эВ.

Проведены расчёты с использованием различных приближений для локального обменного потенциала как с учётом, так и без учёта корреляцион-

ных поправок. Значения расчётной нормальной плотности при использовании обменно-корреляционного потенциала Хедина-Лундквиста [42] всегда немного выше, чем при использовании обменного потенциала Кона-Шэма [43]. Если не учитывается явная зависимость потенциала от температуры (как в случае потенциала Кона-Шэма или Хедина-Лундквиста), то при $\rho \gtrsim \rho_0$ значения тепловых компонент слабо зависят от того, учитывается или нет корреляционное слагаемое в потенциале; различия наблюдаются лишь при $\rho \lesssim \rho_0$, $T \lesssim 10$ эВ.

Учёт зависимости обменного потенциала от температуры [4] относительно слабо сказывается на виде основных ударных адиабат (для более лёгкого элемента бериллия эффект несколько выше, чем для более тяжёлого алюминия). Но использование обменного потенциала, зависящего явно от температуры, при низких температурах ($T \lesssim 1$ эВ) и $\rho \sim \rho_0$ может приводить к нефизическим отрицательным значениям энтропии электронов, электронной теплоёмкости и тепловых электронных компонент внутренней энергии и давления из-за наличия слагаемых, содержащих логарифм температуры, в разложении плотности обменной энергии при низких температурах [44]. Это говорит о недостаточно точном учёте тепловых эффектов при $T \lesssim 1$ эВ и $\rho \sim \rho_0$ в обменном потенциале, предложенном в [4, 44–46].

Уравнения состояния электронов, построенные на основе энтропии [26] и на основе свободной энергии Гельмгольца [29], практически совпадают (в данной работе в пределах точности вычислений расхождений не обнаружено). Это говорит о том, что термодинамическая несогласованность формул для внутренней энергии и для энтропии в модели Либермана незначительна.

Учёт вклада ионов в уравнение состояния в приближении заряженных твёрдых сфер (см. [2], с. 300) даёт в целом менее удовлетворительные результаты, чем в квазизонной модели, что связано с различием в распределении электронной плотности в атомной ячейке (вследствие различия граничных условий для волновых функций электронов). Приближение заряженных твёрдых сфер в модели Либермана достаточно хорошо работает для металлов вблизи нормальной плотности (для элементов с большими и средними Z результаты значительно лучше согласуются с экспериментальными данными по ударно-волновому сжатию, чем при учёте ионов в приближении идеального газа), но при плотностях в несколько раз больших или меньших нормальной обычно переоценивает ионное давление. Это приводит, в частности, к более «жёстким» по сравнению с экспериментом ударным адиабатам при больших сжатиях. В связи с этим метод вычисления ионных компонент термодинамических величин в модели Либермана требуется уточнить, в частности, в рамках модели заряженных твёрдых сфер требуется усовершенствовать способ вычисления эффективных радиусов ионов.

При увеличении плотности вещества значения термодинамических вели-

чин по модели Либермана плавно выходят на асимптотику модели Томаса-Ферми, причём в случае элементов с достаточно простой электронной структурой (алюминий, бериллий) удовлетворительное согласие тепловых электронных компонент (отличие от результатов по модели Томаса-Ферми до нескольких десятков процентов) наблюдается уже при нормальной плотности даже при температурах, близких к нулю.

Для расчётов коэффициентов поглощения фотонов в спектральных линиях в данной работе использован суперконфигурационный подход [31, 32]. Вероятности реализации электронных конфигураций вычисляются с использованием биномиального распределения, применяющегося в рамках суперконфигурационного подхода [31]. В проведённой работе не учитывались взаимодействие конфигураций [47–51] и эффекты релаксации орбиталей [52, 53]. Статистическое уширение пиков в сечении фотоионизации, связанных с отличием плотности состояний в непрерывном спектре от плотности состояний однородного электронного газа, учитывается путём введения спектрального профиля [37], аналогичного профилю спектральной линии для перехода электрона между состояниями дискретного спектра.

Как и термодинамические величины, коэффициенты поглощения фотонов (как спектральные, так и усреднённые по Росселанду и по Планку) плавно зависят от плотности и температуры вещества, в том числе в тех областях, где существенны эффекты ионизации давлением.

В настоящее время результаты расчётов по программе RESEOS используются для построения баз данных термодинамических и оптических свойств веществ, необходимых для решения различных практических задач физики высоких плотностей энергии.

Список литературы

- [1] *Фортос В.Е.* Экстремальные состояния вещества на Земле и в космосе. — М.: Физматлит, 2008.
- [2] *Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. Методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. — М.: Физматлит, 2000. — 400 с.
- [3] *Воропинов А.И., Гандельман Г.М., Подвальный В.Г.* Электронные энергетические спектры и уравнения состояния твёрдых тел при высоких давлениях и температурах // *УФН.* — 1970. — Т. 100. — С. 193 – 224.
- [4] *Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б.* Модифицированная модель Хартри-Фока-Слэтера для вещества с заданной температурой и плотно-

стью // *ВАНТ. Методики и программы численного решения задач математической физики.* — 1979, вып. 4(6). — С. 16 – 26.

- [5] *Грушин А.С., Новиков В.Г.* Квазизонная модель вещества // Научно-координационная сессия «Исследования неидеальной плазмы». — М., 2007. <http://www.ihed.ras.ru/npp2007/presentations/grushin.pdf>.
- [6] *Rozsnyai B.F.* Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density // *Phys. Rev. A.* — 1972. — Vol. 5. — Pp. 1137 – 1149.
- [7] *Rozsnyai B.F.* Shock Hugoniot based on the self-consistent average atom (SCAA) model. Theory and experiments. (Second revision) // *HEDP.* — 2012. — Vol. 8. — P. 88 – 100.
- [8] *Lieberman D.A.* Self-consistent field model for condensed matter // *Phys. Rev. B.* — 1979. — Vol. 20. — Pp. 4981 – 4989.
- [9] *More R.M.* Pressure ionization, resonances, and the continuity of bound and free states // *Advances in atomic and molecular physics.* — 1985. — Vol. 21. — Pp. 305 – 356.
- [10] *Feynman R., Metropolis N., Teller E.* Equations of state of elements based on the generalized Fermi-Thomas theory // *Phys. Rev.* — 1949. — Vol. 75. — Pp. 1561 – 1573.
- [11] *Калиткин Н.Н.* О термодинамических асимптотиках моделей вещества в экстремальных условиях // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР № 43. — М., 1986.
- [12] *Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В.* Статистическая модель вещества // *УФН.* — 1975. — Т. 117. — С. 3 – 47.
- [13] *Новиков В.Г., Овечкин А.А.* Расчёты уравнения состояния по модели ограниченного атома // *Математическое моделирование.* — 2010. — Т. 22. — С. 69 – 82.
- [14] *Овечкин А.А., Новиков В.Г., Грушин А.С.* Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля // *ТВТ.* — 2011. — Т. 49. — С. 845 – 855.
- [15] *Новиков В.Г., А.А.Овечкин.* Роль резонансных состояний при выдавливании дискретных уровней в непрерывный спектр // Препринт ИПМ им М.В. Келдыша РАН № 31. — М., 2009.

- [16] *Новиков В.Г., А.А.Овечкин.* Расчёты уравнения состояния урана по модели ограниченного атома // Препринт ИПМ им М.В. Келдыша РАН № 51. — М., 2009.
- [17] *Новиков В.Г., А.А.Овечкин.* Вычисление давления в модели ограниченного атома // Препринт ИПМ им М.В. Келдыша РАН № 77. — М., 2009.
- [18] *Новиков В.Г., А.А.Овечкин, Грушин А.С.* Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля // Препринт ИПМ им М.В. Келдыша РАН № 24. — М., 2010.
- [19] *Novikov V.G., Grushin A.S., Ovechkin A.A.* Quasizones and resonances in the selfconsistent field models of dense plasma // in Physics of extreme states of matter-2009. — Chernogolovka, 2009. — Pp. 157 – 159.
- [20] *Новиков В.Г., Овечкин А.А.* Роль резонансных состояний при ионизации давлением // Сборник трудов научной сессии МИФИ-2010. — М: МИФИ.
- [21] *Грушин А.С., Лобода П.А., Новиков В.Г. et al.* Расчёты уравнений состояния и непрозрачностей по программе RESEOS // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции XIII Харитоновские тематические научные чтения. С. 328 - 335. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011.
- [22] *Лобода П.А., Овечкин А.А., Шадрин А.А.* Расчёт уравнений состояния и ударных адиабат металлов по теоретическим моделям плотного ионизованного вещества с учётом оболочечных эффектов // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции XIII Харитоновские тематические научные чтения. С. 297 - 308. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011.
- [23] *Воеводин В.В., Воеводин Вл.В.* Параллельные вычисления. — СПб.: БХВ-Петербург, 2002. — 608 с.
- [24] *Bar-Shalom A., Oreg J., Klapisch M.* EOSTA - an improved EOS quantum mechanical model in the STA opacity code // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* — 2006. — Vol. 99. — Pp. 35 – 54.
- [25] *Blenski T., Cichocki B.* Variational theory of average-atom and superconfigurations in quantum plasmas // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 75, 056402.
- [26] *Penicaud M.* An average atom code for warm matter: application to aluminium and uranium // *J. Phys.: Condens. Matter.* — 2009. — Vol. 21, 095409.

- [27] *Елисеев Г.М., Клинишов Г.Е.* Уравнение состояния твёрдых веществ и его сплайн-аппроксимация // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша АН СССР № 173. — М., 1982.
- [28] *Сапожников А.Т., Першина А.В.* Полуэмпирическое уравнение состояния металлов в широком диапазоне плотностей и температур // *ВАНТ. Методики и программы численного решения задач математической физики.* — 1979, вып. 4(6). — С. 47 – 56.
- [29] *Wilson B., Sonnad V., Sterne P., Isaacs W.* Purgatorio - a new implementation of the Inferno algorithm // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.* — 2006. — Vol. 99. — Pp. 658 – 679.
- [30] *Бушман А.В., Ломоносов И.В., Хищенко К.В.* База данных по ударному сжатию материалов и веществ. <http://teos.fcrp.ac.ru/rusbank/>.
- [31] *Bar-Shalom A., Oreg J., Goldstein W.H. et al.* Super-transition arrays: A model for the spectral analysis of hot, dense plasma // *Phys. Rev. A.* — 1989. — Vol. 40. — Pp. 3183 – 3193.
- [32] *Bar-Shalom A., Oreg J., Goldstein W.H.* Effect of configuration widths on the spectra of local thermodynamic equilibrium plasmas // *Phys. Rev. E.* — 1995. — Vol. 51. — Pp. 4882 – 4890.
- [33] *Gilleron F., Pain J.-C.* Stable method for the calculation of partition functions in the superconfiguration approach // *Phys. Rev. E.* — 2004. — Vol. 69, 056117.
- [34] *Stein J., Shalitin D., Ron A.* Average-atom models of line broadening in hot dense plasmas // *Phys. Rev. A.* — 1985. — Vol. 31. — Pp. 446 – 450.
- [35] *Драгалов В.В., Новиков В.Г.* Распределение спектральных линий в плазме по флуктуациям чисел заполнения // *ТВТ.* — 1987. — Т. 25. — С. 1057 – 1061.
- [36] *Драгалов В.В., Никифоров А.Ф., Новиков В.Г. и др.* Статистический метод расчёта поглощения фотонов в плотной высокотемпературной плазме // *Физика плазмы.* — 1990. — Т. 16. — С. 77 – 85.
- [37] *Драгалов В.В., Новиков В.Г.* Приближённый учёт конфигураций ионов в расчётах сечений фотоионизации плотной высокотемпературной плазмы // *ТВТ.* — 1989. — Т. 27. — С. 214 – 219.

- [38] *Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B.* Quantum-statistical models of hot dense matter. Methods for computation opacity and equation of state. — Basel: Birkhauser, 2005. — 437 pp.
- [39] *Foster J. M., Hoarty D. J., Smith C. C. et al.* L-shell absorption spectrum of an open-M-shell germanium plasma: Comparison of experimental data with a detailed configuration-accounting calculation // *Phys. Rev. Lett.* — 1991. — Vol. 67. — Pp. 3255 – 3258.
- [40] National institute of standards and technologies. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/html/form.html>.
- [41] Center of X-ray optics. <http://cxro.lbl.gov>.
- [42] *Hedin L., Lundqvist B.I.* Explicit local exchange-correlation potentials // *J. Phys. C: Solid St. Phys.* — 1971. — Vol. 4. — Pp. 2064 – 2083.
- [43] *Kohn W., Sham L.J.* Self-consistent equations including exchange and correlation effects // *Phys. Rev.* — 1965. — Vol. 140. — Pp. A1133 – A1138.
- [44] *Horowitz B., Thieberger R.* Exchange integral and specific heat of the electron gas // *Physica.* — 1974. — Vol. 71. — P. 99 – 105.
- [45] *Perrot F.* Gradient correction to the statistical electronic free energy at nonzero temperatures: Application to equation-of-state calculations // *Phys. Rev. A.* — 1979. — Vol. 20. — Pp. 586 – 594.
- [46] *Gupta U., Rajagopal A.K.* Inhomogeneous electron gas at nonzero temperatures: Exchange effects // *Phys. Rev. A.* — 1980. — Vol. 21. — Pp. 2064 – 2066.
- [47] *Oreg J., Goldstein W. H., Bar-Shalom A., Klapisch M.* Configuration-average energy shift owing to configuration interaction // *Phys. Rev. A.* — 1989. — Vol. 39. — Pp. 4599 – 4609.
- [48] *Bar-Shalom A., Oreg J., Goldstein W.H.* Configuration interaction in LTE spectra of heavy elements // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* — 1994. — Vol. 51. — Pp. 27 – 39.
- [49] *Bar-Shalom A., Oreg J., Klapisch M., Lehecka T.* Effect of configuration interaction on shift widths and intensity redistribution of transition arrays // *Phys. Rev. E.* — 1999. — Vol. 59. — Pp. 3512 – 3525.

- [50] *Bar-Shalom A., Oreg J., Klapisch M.* The effect of configuration interaction on relativistic transition arrays // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* — 2000. — Vol. 65. — Pp. 415 – 428.
- [51] *Gilleron F., Bauche J., Bauche-Arnoult C.* A statistical approach for simulating detailed-line spectra // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2007. — Vol. 40. — P. 3057 – 3074.
- [52] *Blenski T., Grimaldi A., Perrot F.* Hartree-Fock statistical approach to atoms and photoabsorption in plasmas // *Phys. Rev. E.* — 1997. — Vol. 55. — Pp. R4889 – R4892.
- [53] *Bar-Shalom A., Oreg J.* Recent progress in the EOSTA model // *HEDP.* — 2007. — Vol. 3. — Pp. 12 – 19.

Работы автора по теме диссертации

1. *В.Г. Новиков, А.А. Овечкин.* Расчёты уравнения состояния по модели ограниченного атома. // Математическое моделирование **22**, 69 – 82 (2010).
V.G. Novikov, A.A. Ovechkin. Calculations of the equation of state by Liberman model. // *Mathematical models and computer simulations* **3**, 290 – 299 (2011).
2. *А.А. Овечкин, В.Г. Новиков, А.С. Грушин.* Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля. // ТВТ **49**, 845 – 855 (2011).
A.A. Ovechkin, V.G. Novikov, A.S. Grushin Peculiarities of calculating entropy in self-consistent field models. // *High temperature* **49**, 815 – 825 (2011).
А.А. Овечкин, В.Г. Новиков, А.С. Грушин. Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля. // М: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2010, препр. № 24, 25 с.
3. *V.G. Novikov, A.S. Grushin, A.A. Ovechkin.* Quasizones and resonances in the selfcon-sistent field models of hot dense plasma. // in *Physics of extreme states of matter* — 2009, Chernogolovka, 2009, p. 157 - 159.
4. *В.Г. Новиков, А.А. Овечкин.* Роль резонансных состояний при выдавливании дискретных уровней в непрерывный спектр. // М: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2009, препр. № 31, 22 с.

5. *В.Г. Новиков, А.А. Овечкин.* Расчёты уравнения состояния урана по модели ограниченного атома. // М: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2009, препр. № 51, 26 с.
6. *В.Г. Новиков, А.А. Овечкин.* Вычисление давления в модели ограниченного атома. // М: ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, 2009, препр. № 77, 26 с.
7. *В.Г. Новиков, А.А. Овечкин.* Роль резонансных состояний при ионизации давлением // Сборник трудов научной сессии МИФИ — 2010, М, 2010.
8. *А.С. Грушин, П.А. Лобода, В.Г. Новиков, А.А. Овечкин, В.В. Попова, А.Д. Соломянная, А.А. Шадрин.* Расчёты уравнений состояния и непрозрачностей по программе RESEOS. // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции «XIII Харитоновские тематические научные чтения», РФЯЦ—ВНИИЭФ, Саров, 2011, с. 328 - 335.
9. *П.А. Лобода, А.А. Овечкин, А.А. Шадрин.* Расчёт уравнений состояния и ударных адиабат металлов по теоретическим моделям плотного ионизованного вещества с учётом оболочечных эффектов. // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны. Труды международной конференции «XIII Харитоновские тематические научные чтения», РФЯЦ—ВНИИЭФ, Саров, 2011, с. 297 - 308.