

УДК 536.71

**Расчет ударной сжимаемости железа и его сплавов
в широком диапазоне плотностей и температур**

М.А. Кадатский^{1,2}, К.В. Хищенко^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Объединённый институт высоких температур РАН

Железо является широко распространенным компонентом в различных конструкционных материалах, в том числе подвергающихся интенсивным тепловым и силовым нагрузкам. Важной технической задачей является предсказание поведения материалов при воздействии ударных волн сверхвысоких давлений. Знание уравнения состояния необходимо для проведения численного моделирования процессов, протекающих в этих условиях.

Для построения уравнений состояния вещества широко используются различные квантово-статистические модели, использующие приближение самосогласованного атомного потенциала. Применение таких приближений тем более оправдано, чем выше температура и плотность вещества.

Простейшая из этих моделей — обобщённая модель Томаса–Ферми (ТФ), в основе которой лежит использование квазиклассического приближения для электронов. Учет обменных и квантовых эффектов в рамках приближения ТФ приводит к модели Томаса–Ферми с поправками (ТФП). Разделение электронов на относящиеся к непрерывному и дискретному спектру (первые учитываются в квазиклассическом приближении, для вторых рассчитываются волновые функции), а также дополнительный учет обменной энергии в квазиклассическом приближении дают уравнения модели Хартри–Фока–Слэтера (ХФС) [1].

Важной и отдельной задачей при этом является расчет свойств веществ, представляющих собой смесь различных химических элементов (соединения, сплавы и другие смеси). Ее решение имеет важное практическое значение, поскольку сплавы и соединения широко применяются в качестве материалов различного назначения.

В работе представлены результаты расчетов ударных адиабат железа и сплава железо–медь в широком диапазоне плотностей и температур по трем квантово-статистическим моделям (ТФ, ТФП и ХФС) для электронной подсистемы. Отдельно рассмотрено влияние теплового движения ионов и ионно-ионного взаимодействия на примере моделей идеального газа, однокомпонентной плазмы и системы заряженных твердых сфер. Проведено сравнение результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными.

Литература

1. *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: Birkhäuser Verlag, 2005.*