

50-я научная конференция МФТИ
Факультет проблем физики и энергетики
Секция физики высоких плотностей энергии

УДК 54.01

Боцан А.В.¹, Левашов П.Р.²

¹ Московский физико-технический институт (государственный университет)

² Объединённый институт высоких температур РАН

**Методы расчёта изоэнтропы по результатам
численного Монте-Карло моделирования**

В работе представлены результаты расчётов изоэнтропы сжатия дейтерия двумя различными методами: методом пробной частицы [1] и методом Зельдовича. В основе каждого метода лежит моделирование диссоциативного равновесия методом Монте-Карло для реагирующих смесей (МКРС) [2]. В первом методе химический потенциал представляется в виде суммы 2 слагаемых, первое из которых является химическим потенциалом идеального газа, а второе отвечает за взаимодействие частиц. Путём вычисления изменения конфигурационной энергии при внесении пробной частицы можно оценить второе слагаемое. Данная процедура проводится для атомов и молекул по отдельности и позволяет рассчитать химический потенциал смеси. Зная химический потенциал, легко получить свободную энергию, а затем и любую термодинамическую функцию. Суть второго метода состоит в том, что из первого начала термодинамики легко получить неоднородное линейное дифференцируемое уравнение в частных производных, характеристиками которого являются уравнения изоэнтропы. С помощью интегрирования уравнения характеристик на основе таблицы термодинамических данных, полученных из МКРС, можно восстановить давление и энергию на изоэнтропе. Полученные результаты находятся в превосходном согласии с экспериментальными данными [3].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Arrieta E., Jedrzejek C., Marsh K.N.* Monte Carlo results for binary multi-Yukawa mixtures. Evaluation of the accuracy of the mean spherical approximation for realistic hard-core potentials // *J. Chem. Phys.* — 1991. — V. 95. — P. 6838–6848.
2. *Боцан А.В., Левашов П.Р.* Моделирование диссоциативного равновесия и ударной адиабаты в газах методом Монте-Карло // *Физика экстремальных состояний вещества.* — 2007. — С. 244–246.
3. *Мочалов М.А.* Частное сообщение.

Представленная выше версия доклада является ознакомительной.

Версию доклада, предназначенную для печати,
можно найти в факультетском сборнике трудов конференции.
Электронные материалы конференции публикуются по адресу
http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen_sections/