

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

---

УДК 536.2

*Шемякин О.П.<sup>1,2</sup>, Хищенко К.В.<sup>2</sup>*

<sup>1</sup> Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup> Объединённый институт высоких температур РАН

**Использование модели Хартри–Фока–Слэтера  
для расчёта уравнения состояния алюминия  
при высоких температурах и давлениях**

Метод самосогласованного поля основан на предположении, что приближённое описание системы многих взаимодействующих частиц возможно посредством введения волновых функций для каждой частицы системы в отдельности [1]. Для учёта взаимодействия с другими частицами вводится усредненное поле, создаваемое остальными движущимися частицами и выражаемое с помощью их одночастичных волновых функций. Эти волновые функции должны быть согласованными, то есть являться решением уравнения Шредингера для одной частицы, движущейся в среднем поле, которое создаётся другими частицами, и определять средний потенциал поля, в котором движется каждая из частиц. Простейший метод введения самосогласованного поля определен в модели Томаса–Ферми [2]. В этой модели определяется плотность распределения частиц в пространстве вместо их волновых функций, причём получаемая концентрация электронов является согласованной с создаваемым электронами потенциалом в рамках квазиклассического приближения. Однако вычисленные для потенциала Томаса–Ферми волновые функции дают электронную плотность, не совпадающую с исходной плотностью электронов по модели Томаса–Ферми [1]. При получении электронной плотности здесь используется лишь её постоянная составляющая, которая вычисляется по средним числам заполнения в квазиклассическом приближении, и это исключает описание осцилляций волновых функций, а с ними и осцилляций термодинамических функций вещества. Этот осцилляционный эффект учитывается в более сложных моделях самосогласованного поля Хартри, Хартри–Фока, Хартри–Фока–Слэтера [1] и др.

Настоящая работа посвящена разработке уравнения состояния металлов для широкого диапазона температур и давлений на основе модели Хартри–Фока–Слэтера. Развиваемый полуэмпирический подход был ранее использован для описания термодинамических свойств алюминия с учётом вклада электронной компоненты в уравнение состояния по модели Томаса–Ферми [3].

В работе проводится сравнение расчётных изолиний термодинамических функций (изохор, изотерм) алюминия, полученных в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера, с результатами расчётов по модели Томаса–Ферми.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б.* Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000.
2. *Feynman R., Metropolis N., Teller E.* Equations of state of elements based on the generalized Fermi–Thomas theory // Phys. Rev. — 1949. — V. 75, № 10. — P. 1561–1573.
3. *Хищенко К.В., Шемякин О.П.* Полуэмпирическое уравнение состояния алюминия на основе модели Томаса–Ферми // Физика экстремальных состояний вещества. — 2006. — Черногоровка: ИПХФ РАН, 2006. — С. 261–263.

---

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/](http://www.mipt.ru/nauka/conf50/plen_sections/)