

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛОТНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ГАЗОВ В КВАЗИХИМИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

*Грязнов В.К.,*¹ Иосилевский И.Л.^{2,3}*

¹*ИПХФ РАН, Черноголовка, Россия,* ²*ОИВТ РАН, Москва, Россия,*

³*МФТИ, Долгопрудный, Россия*

**grvk@fcr.ac.ru*

Интерес к исследованию термодинамических свойств молекулярных газов при высоких давлениях и температурах связан как с их широким распространением в природе, так и с широким применением в различных высокоэнергетических устройствах. При давлениях мегабарного диапазона, где высокая плотность вещества сопровождается сильным кулоновским взаимодействием (сильно неидеальная плазма) теплофизические свойства газов теоретически описывались как в рамках квазихимического представления (модель свободной энергии), так и "первоприципными" методами, использующими прямое численное моделирование системы ядер и электронов. Несмотря на достигнутые успехи как в экспериментальных, так и теоретических исследованиях, дальнейшее изучение свойств плотных газов в этой области параметров имеет большое значение. Имеющиеся к настоящему времени экспериментальные данные по калорическому и термическому уравнению состояния перекрывают диапазон давлений от килобар до десятков мегабар и высоких плотностей. В последнее время были получены и теоретические результаты, как в рамках химической модели, так и первопринципными методами в широком диапазоне параметров. В данной работе представлены результаты вычисления изохор водорода в широком диапазоне температур, ударных адиабат дейтерия и азота и изоэнтроп дейтерия до мегабарных давлений. Результаты были получены при помощи кодов, реализующих усовершенствованные модели семейства SANA. Вычисления показали, что в рассматриваемом диапазоне динамических давлений сжатые молекулярные газы представляет собой сильно неидеальную вырожденную плазму с плотностями близкими к плотности конденсированного вещества. Результаты проведенных вычислений представлены в сравнении с данными, полученными при расчете из первых принципов и данными экспериментов. Показано, что представляемый подход позволяет получить адекватное описание теплофизических свойств молекулярных газов в широком диапазоне температур и давлений, обеспечивая удовлетворительное согласие как с экспериментом, так и другими теоретическими подходами.