

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**и.о. директора физтех-школы
физики и исследований им.
Ландау**

А.А. Воронов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Модели расчета химического и ионизационного равновесия
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра физики высоких плотностей энергии
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: И.Л. Иосилевский, д-р физ.-мат. наук, старший научный сотрудник

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высоких плотностей энергии 04.06.2020

Аннотация

Общие сведения о практических методах массовых прикладных расчетов термодинамики сильно сжатой плазмы в традиционном квазихимическом представлении («химическая модель плазмы») и в подходах, альтернативных квазихимическому представлению, модель Томаса – Ферми в сочетании с приближением средней атомной ячейки Вигнера – Зейтца, современные первопринципные подходы, основанные на методе функционала плотности и прямом численном моделировании и др. Специфика практических требований, вытекающая из главных прикладных ситуаций, к термодинамическому описанию в диапазоне от нескольких тысяч (перспективные энергоустройства химической и ядерной энергетики) до миллионов градусов Кельвина (плазма Солнца и других астрофизических приложений). Специфика штатных рабочих процессов существующих и перспективных ядерных энергоустройств и возможных отклонений в рамках проблемы ядерной безопасности. Сведения о концепции и истории разработок высокотемпературных вариантов так называемого «Газофазного ядерного реактора». Характерные теоретические проблемы термодинамики плотной неидеальной плазмы, диктуемые этим и подобными приложениями.

Концепция расчета равновесного состава и набора термодинамических функций плотной неидеальной химически реагирующей плазмы методом минимизации свободной энергии системы при наложенных линейных ограничениях. Анализ формализма термодинамического описания таких прикладных систем. Структура свободной энергии многокомпонентной частично ионизованной, неидеальной, химически реагирующей системы в важном для традиционных и вновь возникающих приложений проблем. Полная система уравнений химического и ионизационного равновесия плотных, высокотемпературных, неидеальных газоплазменных систем. Формальная схема и дуализм реальных методов минимизации свободной энергии в массовых прикладных расчетах. Проблема химического и электрохимического потенциалов плотной неидеальной плазмы. Формализм описания и поиска границ фазовых переходов в рамках квазихимического подхода. Условия одновременного химического, ионизационного и фазового равновесия в формализме квазихимического представления. Характерные особенности неконгруэнтных фазовых превращений в химически реагирующей плотной неидеальной плазме продуктах высокотемпературного нагрева и разложения рабочих веществ объектов ядерной энергетики. Формализм описания неконгруэнтного фазового равновесия в рамках квазихимического подхода. Связь проблемы неконгруэнтного фазового равновесия в высокотемпературной системе уран – кислород с концепцией и разрабатываемыми практическими методами утилизации отработанного ядерного топлива (ОЯТ).

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- формирование базовых знаний по геометрии для дальнейшего использования в других областях математического знания и дисциплинах естественнонаучного содержания;
- формирование математической культуры, исследовательских навыков и способности применять знания на практике.

Задачи дисциплины

- формирование у обучающихся базовых знаний по термодинамике газоплазменного состояния;
- формирование общефизической культуры: умение мыслить в категориях термодинамики и статистической физики, проводить вывод основных формул;
- формирование умений и навыков применять полученные знания для понимания и описания химического и ионизационного равновесия в неидеальной плазме, самостоятельного анализа полученных результатов.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности

ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- ☐ фундаментальные понятия, законы, теории классической и современной физики плазмы и химической термодинамики;
- ☐ порядки фундаментальных физических величин, характерных для термодинамики вещества с высокой концентрацией энергии в состоянии многофазной, многокомпонентной химически активной плазмы;
- ☐ понимание современных проблем физики и химии вещества с высокой концентрацией энергии, и сопутствующих вычислительных математических проблем;
- ☐ понимать формы проявления различных фазовых превращений в термодинамике вещества с высокой концентрацией энергии; основные понятия термодинамики и физики плазмы;
- ☐ термодинамические функции, производящие термодинамический потенциалы, классификацию типов термодинамического равновесия, особенностей термического и калорического уравнений состояния, взаимосвязи аномалий термодинамических и гидродинамических процессов, специфику термодинамического описания адиабатических процессов и течений газоплазменных сред, виды фазовых состояний и опорных объектов на фазовых диаграммах вещества, типы фазовых превращений в газоплазменных средах.

уметь:

- ☐ абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных физических ситуаций в проблемах энергетики и физики высоких плотностей энергии;
- ☐ пользоваться своими знаниями для решения фундаментальных и прикладных задач в области физики высоких плотностей энергии;
- ☐ делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- ☐ производить численные оценки по порядку величины;
- ☐ делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- ☐ видеть в прикладных задачах энергетики их главное физическое содержание;
- ☐ осваивать новые предметные области, теоретические подходы и вычислительные методики в термодинамике реагирующих кулоновских систем и вещества в экстремальных состояниях;
- ☐ эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов;
- ☐ решать простейшие задачи термодинамики и физики плазмы методом уравнений состояния и канонических преобразований наборов термодинамических неравенств; – использовать язык фазовых диаграмм для решения задач;
- ☐ использовать различные виды и определять тип кривых и поверхностей уравнений состояния вещества;
- ☐ уметь исследовать свойства устойчивости термодинамических сред по заданному уравнению состояний.

владеть:

- ☐ навыками освоения большого объема информации;
- ☐ навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- ☐ культурой постановки и численного моделирования задач в физике высоких плотностей энергии;
- ☐ практикой расчетно-теоретического метода исследования и решения теоретических и прикладных задач в физике высоких плотностей энергии;
- ☐ математическим аппаратом термодинамики, химической физики и физики плазмы, аналитическими методами исследования уравнения состояний и фазовых переходов.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Общие сведения о методах расчета термодинамики сильно сжатой плазмы в подходах, альтернативных квазихимическому представлению.	4			4
2	Описание эффектов неидеальности в термодинамике газоплазменных систем в формализме химической модели плазмы.	6			6
3	Особенности кулоновской неидеальности в плотной плазме.	4			4
4	Проблема термодинамической устойчивости и фазовых переходов в неидеальной плазме в формализме химической модели.	6			6
5	Структура термодинамических зависимостей газоплазменного состояния в представлении химической модели плазмы.	4			4

6	Термодинамика плазмы в представлениях "химической модели".	6		6
Итого часов		30		30
Подготовка к экзамену		30 час.		
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.		

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

1. Общие сведения о методах расчета термодинамики сильно сжатой плазмы в подходах, альтернативных квазихимическому представлению.

Ячеечное приближение для описания плотной и сверхплотной плазмы. Связь с вариационным принципом статистической механики. Описание электронной компоненты: модель Томаса-Фермии ее модификации для вырожденных электронов и приближение Пуассона-Больцмана – для невырожденных. Оболочечные эффекты. Модель Хартри-Фока-Слетера. Описание вклада ядерных степеней свободы. Модернизации ячейчного подхода. Модель осциллирующей ячейки. Модель “ограниченного атома”.

Возможности и перспективы методов *ab initio* в описании термодинамики плотной неидеальной плазмы. Общая характеристика классических и квантовых методов Монте-Карло (MC) и Молекулярной Динамики (MD) в сочетании с Методом Функционала Плотности (DFT). Термодинамика плотного водорода в предсказании традиционных моделей и первопринципных подходов.

2. Описание эффектов неидеальности в термодинамике газоплазменных систем в формализме химической модели плазмы.

Терминология. "Поправки на неидеальность" и каналы их влияния на термодинамику системы в формализме «химической модели». Связь с дилеммой подходов «метод смеси» и «метод исходных атомов» в химической термодинамике неидеальных нейтральных реагирующих систем. Неидеальность в кулоновских системах. Определяющие безразмерные параметры неидеальности и вырождения. Стандартный вывод дебаевского приближения для многокомпонентной плазмы в химической модели. Простейшие коррекции дебаевского приближения.

Проблема разделения степеней свободы на внутренние и поступательные. Проблема "обрезания" статсуммы. Краткий обзор подходов и результатов. Понятие эффективных взаимодействий свободных нейтральных и заряженных сортов частиц в формализме химической модели плазмы. Эффективное короткодействующее отталкивание. Влияние кулоновских поправок на неидеальность на структуру и параметры «полос» ионизации и диссоциации. Строение полной N-T диаграммы для водорода с газоплазменной и плотной областями. Взаимодействие заряд-нейтрал и нейтрал-нейтрал в терминах химической модели. Поляризационные и Ван дер Ваальсовы поправки на взаимодействие.

3. Особенности кулоновской неидеальности в плотной плазме.

Дебаевское приближение для поправок на неидеальность. Проблема разделения степеней свободы на внутренние и поступательные. Общие представления об аппарате строгой теории неидеальных систем. Понятие об аппарате диаграммных разложений.

Неидеальная плазма в идеализированных кулоновских моделях. Общие сведения о семействе кулоновских моделей и структуре их фазовых диаграмм. Однокомпонентная классическая плазма (ОКП). Электронный газ. Модели классической ионной смеси и заряженные твердые шары. Фазовые свойства кулоновских моделей.

4. Проблема термодинамической устойчивости и фазовых переходов в неидеальной плазме в формализме химической модели.

Сведения об общих свойствах выпуклости и вогнутости термодинамических потенциалов. Роль экстенсивных и интенсивных термодинамических переменных. Локальные (дифференциальные) и полные (интегральные) условия потери термодинамической устойчивости для термодинамических потенциалов и их производных. Традиционная форма записи и интерпретация. Исключительность энтропии. Условия термодинамической устойчивости в системе многих сортов частиц. Роль матрицы перехода $\partial^2 \phi(i)/\partial n(j)^2$. Нарушение устойчивости в простейших приближениях. Дебаевское приближение. Разбавление нейтралами. Особенности проблемы устойчивости в случае многократной ионизации. Роль взаимодействия заряд-нейтрал и нейтрал-нейтрал.

Понятие о гипотетических «плазменных фазовых переходах» (ПФП). История и современные поиски в плотной плазме водорода, благородных газах и металлах. Результаты экспериментальных поисков ПФП. «Плазменность» обычных переходов газ-жидкость и связь с проблемой перехода металл-диэлектрик в парах металлов.

Условия одновременного химического, ионизационного и фазового равновесия в плотных нейтральных средах и неидеальной одноэлементной плазме и плазме химических смесей и компаундов. Правило Максвелла и правило двойной касательной. Условия Гиббса для нейтральных химически реагирующих смесей. Обобщенный (электрохимический) потенциал и условия Гиббса-Гуггенгейма для простой и многоэлементной плазмы в терминах квазихимического подхода.

Неконгруэнтные фазовые переходы (НФП) в плазме смесей и химических соединений (компаундов). Особенности основных фазовых диаграмм НФП в интенсивных и экстенсивных термодинамических переменных. Разделение границ кипения жидкости и насыщения пара, границ плавления кристалла и замерзания жидкости. Фазовые переходы и полные фазовые диаграммы в уран-содержащих топливах современных и перспективных ядерных реакторов. Связь с проблемой безопасности ядерной энергетики.

5. Структура термодинамических зависимостей газоплазменного состояния в представлении химической модели плазмы.

Термодинамика газоплазменного состояния в «вакуумном» пределе ($T \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow 0$). Химический потенциал как главный «управляющий параметр» в вакуумном пределе. Понятие о «лестнице» ионизации для давления и энергии. Понятие о «термодинамическом спектре» для дифференциальных термодинамических характеристик. Положение «линий» и потенциалы ионизации. Связь параметров лестницы ионизации с фундаментальными термохимическими константами вещества. Энергетическая Шкала вещества. Теплота сублимации как граница Шкалы. Структура лестницы ионизации в метастабильной области.

Профили термодинамических зависимостей в газоплазменной области как суперпозиция полного набора полос диссоциации и всех ступеней ионизации. Общая панорама формы глобального уравнения состояния вещества от газовых до конденсированных плотностей. Понятие о «долине неидеальности» и ее газоплазменном и конденсированном «склонах». Связь с определяющими термохимическими параметрами. Триада: термическая ионизация, ионизация давлением и ионизация разрежением. Полосы реакций как «размытый» фазовый переход. Общее и различия.

6. Термодинамика плазмы в представлениях «химической модели».

Понятие о «физическом» и квазихимическом представлениях (физической и химической моделях плазмы) в термодинамическом описании плотной, неидеальной, химически реагирующей и частично ионизованной плазмы. Варианты деления на идеальную часть и «поправки» на неидеальность. Совершенный газ, идеальный газ с внутренними степенями свободы, многокомпонентная идеальная смесь с взаимными превращениями.

Выбор термодинамических переменных. Полное выражение для свободной энергии многосортной системы. Структура идеальной части. Ноль отсчета энергии и учет термохимии взаимных превращений в квазихимическом представлении. Внутренняя статсумма комплексных частиц. Выделение статсуммы возбуждения. Проблема ограничения («обрезания») статсуммы возбуждения комплексных частиц в плазме. Краткий обзор исторических и современных подходов.

Смысл и роль понятия равновесного состава. Минимизация свободной энергии. Центральная роль химических потенциалов в формулировке методики расчета.

Полная система уравнений для расчета состава и термодинамических функции многокомпонентной неидеальной реагирующей плазмы с произвольной кратностью ионизации и структурой молекулярных реакций. Полная система уравнений для расчета состава и термодинамических функции многокомпонентной неидеальной реагирующей плазмы с произвольной кратностью ионизации и структурой молекулярных реакций. Формальная эквивалентность описания хим.реакций и реакций ионизации.

Термодинамика газоплазменного состояния в рамках приближения идеальной смеси с ионизацией и химическими превращениями. Понятие «полосы ионизации» и «полосы диссоциации» на примере ионизации и диссоциации водорода. Положение полос на фазовой диаграмме. Определяющие параметры. Структура термического и калорического уравнений состояния при пересечении изолированной «полосы» реакции. Фактор сжимаемости (PV/RT) и внепоступательная часть вн.энергии ($U-3/2PV$) как характеристики термического и калорического уравнений состояния. Обобщение на последовательные стадии полной ионизации. «Оболочечные» осцилляции и волны промежуточных кратностей ионизации.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6.Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Грязнов В.К, Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Термодинамика ударно-сжатой плазмы в квазихимическом представлении, Том III-1 приложений к Энциклопедии по физике низкотемпературной плазмы, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы» - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. сс.111-139
2. Иосилевский И.Л. Общая характеристика термодинамического описания низкотемпературной плазмы, Энциклопедия по физике низкотемпературной плазмы, т.I (Под ред. В.Е.Фортова) (М.: Наука, 2000) с.275.
3. Иосилевский И.Л. Старостин А.Н. Проблема термодинамической устойчивости в низкотемпературной плазме, "Энциклопедия по физике низкотемпературной плазмы", т.I (Под ред. В.Е.Фортова) (М.: Наука, 2000) с.327.
4. Фортов В.Е., Якубов И.Т., Храпак А.Г. Физика Неидеальной Плазмы, ИХФ Черногловка, 1984 // Энергоатомиздат, 1994.
5. Эбелинг В., Крефт В., Кремпл Д. - Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме, МИР, Москва, 1979.
6. Иосилевский И.Л. Эффекты неидеальности в низкотемпературной плазме, Энциклопедия низкотемпературной плазмы, Том приложений III-1, Ред. А.Н. Старостин и И.Л. Иосилевский / М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004, сс.349-428.

Дополнительная литература

1. Статистическая физика - учебники: Ландау и Лифшиц // Квасников, МГУ, 1991// Р.Кубо // Р.Фейнман // Уленбек и Форд // Т.Хилл, К.Хуанг (1966) //А.Исихара (1973)
2. Термодинамика - учебники: Базаров И.П. (1976), Кубо (1970)
3. Теплофизика рабочих сред газофазного ядерного реактора /ред. В.М.Иевлев/, Атомиздат, Москва, 1980. (авторы: - Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е.)
4. Грязнов В.К, Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Термодинамика ударно-сжатой плазмы в квазихимическом представлении, Том III-1 приложений к Энциклопедии по физике низкотемпературной плазмы, «Термодинамические свойства низкотемпературной плазмы» М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. сс.111-139
5. Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Сон Э.Е., Фортов В.Е. "Термодинамика и Транспорт в Неидеальной Плазме", Изд-во. МФТИ, Москва, 2000, ISBN 5-89155-017-2 // http://en.edu.ru/shared/files/old/4307_iksf.pdf // Изд-во ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2015 (в печати)
6. Фортов В.Е. Уравнения состояния вещества. От идеального газа до кварк-глюонной плазмы. М.: ФИЗМАТЛИТ, РР. 492 (2012)
7. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. - Физика ударных волн, Наука, М.1966 // ФИИЗМАТЛИТ 2008
8. Крефт В, Кремп Д, Эбелинг В, Репке Г. Квантовая статистика систем заряженных частиц (М.: Мир, 1988)
9. Иосилевский И.Л., Неконгруэнтные фазовые переходы в плазме земных и космических приложений, Доклад на Ученом Совете ОИВТ РАН, 21/09/2011 // http://jiht.ru/science/science_council/presentations/ioselevskiy/demo_IVTAN_sovet_2011_Iosilevskiy_f.ppt.pdf

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Стандартные пакеты Оффиса: PPT, WORD etc.

<http://www.ihed.ras.ru/rusbank/>

<http://www.nist.gov/pml/data/index.cfm>

<http://www.americanelements.com/>

<http://lib.mipt.ru/catalogue/1604/?t=492> – электронная библиотека Физтеха, раздел

<http://www.exponenta.ru> – образовательный физический сайт.

<http://www.edu.ru> – федеральный портал «Российское образование».

<http://benran.ru> –библиотека по естественным наукам Российской академии наук.

<http://www.i-exam.ru> – единый портал Интернет-тестирования в сфере образования.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

На лекционных занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций. Для контроля и коррекции знаний обучающиеся могут использовать компьютерное тестирование, в том числе на портале www.i-exam.ru. В процессе самостоятельной работы обучающихся возможно использование таких программных средств, как Mathcad, Scilab

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, изучающий курс «Модели расчета химического и ионизационного равновесия», должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины «Модели расчета химического и ионизационного равновесия» студент должен знать основные определения и способы расчета равновесного состава и термодинамических функций газов и неидеальной плазмы:

- Понятие о «физическом» и квазихимическом представлениях (физической и химической моделях плазмы) в термодинамическом описании плотной, неидеальной, химически реагирующей и частично ионизованной плазмы. Варианты деления на идеальную часть и «поправки» на неидеальность. Совершенный газ, идеальный газ с внутренними степенями свободы, многокомпонентная идеальная смесь с взаимными превращениями.

- Выбор термодинамических переменных. Полное выражение для свободной энергии многосортной системы. Структура идеальной части. Ноль отсчета энергии и учет термохимии взаимных превращений в квазихимическом представлении. Внутренняя статсумма комплексных частиц. Выделение статсуммы возбуждения. Проблема ограничения ("обрезания") статсумм возбуждения комплексных частиц в плазме. Краткий обзор исторических и современных подходов.
- Смысл и роль понятия равновесного состава. Минимизация свободной энергии. Центральная роль химических потенциалов в формулировке методики расчета.
- Полная система уравнений для расчета состава и термодинамических функции многокомпонентной неидеальной реагирующей плазмы с произвольной кратностью ионизации и структурой молекулярных реакций. Полная система уравнений для расчета состава и термодинамических функций многокомпонентной неидеальной реагирующей плазмы с произвольной кратностью ионизации и структурой молекулярных реакций. Формальная эквивалентность описания хим.реакций и реакций ионизации.
- Термодинамика газоплазменного состояния в рамках приближения идеальной смеси с ионизацией и химическими превращениями. Понятие «полосы ионизации» и «полосы диссоциации» на примере ионизации и диссоциации водорода. Положение полос на фазовой диаграмме. Определяющие параметры. Структура термического и калорического уравнений состояния при пересечении изолированной «полосы» реакции. Фактор сжимаемости (PV/RT) и внепоступательная часть вн.энергии ($U-3/2PV$) как характеристики термического и калорического уравнений состояния. Обобщение на последовательные стадии полной ионизации. «Оболочечные» осцилляции и волны промежуточных кратностей ионизации.
- Термодинамика газоплазменного состояния в «вакуумном» пределе ($T \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow 0$). Химический потенциал как главный «управляющий параметр» в вакуумном пределе. Понятие о «лестнице» ионизации для давления и энергии. Понятие о «термодинамическом спектре» для дифференциальных термодинамических характеристик. Положение «линий» и потенциалы ионизации. Связь параметров лестницы ионизации с фундаментальными термохимическими константами вещества. Энергетическая Шкала вещества. Теплота сублимации как граница Шкалы. Структура лестницы ионизации в метастабильной области.
- Профили термодинамических зависимостей в газоплазменной области как суперпозиция полного набора полос диссоциации и всех ступеней ионизации. Общая панорама формы глобального уравнения состояния вещества от газовых до конденсированных плотностей. Понятие о «долине неидеальности» и ее газоплазменном и конденсированном «склонах». Связь с определяющими термохимическими параметрами. Триада: термическая ионизация, ионизация давлением и ионизация разрежением. Полосы реакций как «размытый» фазовый переход. Общее и различия.
- "Поправки на неидеальность" и каналы их влияния на термодинамику системы в формализме «химической модели». Связь с дилеммой подходов «метод смеси» и «метод исходных атомов» в химической термодинамике неидеальных нейтральных реагирующих систем. Неидеальность в кулоновских системах. Определяющие безразмерные параметры неидеальности и вырождения. Стандартный вывод дебаевского приближения для многокомпонентной плазмы в химической модели. Простейшие коррекции дебаевского приближения.
- Проблема разделения степеней свободы на внутренние и поступательные. Проблема "обрезания" статсуммы. Краткий обзор подходов и результатов. Понятие эффективных взаимодействий свободных нейтральных и заряженных сортов частиц в формализме химической модели плазмы. Эффективное короткодействующее отталкивание. Влияние кулоновских поправок на неидеальность на структуру и параметры «полос» ионизации и диссоциации. Строение полной N-T диаграммы для водорода с газоплазменной и плотной областями. Взаимодействие заряд-нейтрал и нейтрал-нейтрал в терминах химической модели. Поляризационные и Ван дер Ваальсовы поправки на взаимодействие.
- Сведения об общих свойствах выпуклости и вогнутости термодинамических потенциалов. Роль экстенсивных и интенсивных термодинамических переменных. Локальные (дифференциальные) и полные (интегральные) условия потери термодинамической устойчивости для термодинамических потенциалов и их производных. Традиционная форма записи и интерпретация. Исключительность энтропии. Условия термодинамической устойчивости в системе многих сортов частиц. Роль матрицы перехода $\partial^2 \Phi(i)/\partial n(j)^2$. Нарушение устойчивости в простейших приближениях. Дебаевское приближение. Разбавление нейтралами. Особенности проблемы устойчивости в случае многократной ионизации. Роль взаимодействия заряд-нейтрал и нейтрал-нейтрал.

- Понятие о гипотетических “плазменных фазовых переходах” (ПФП). История и современные поиски в плотной плазме водорода, благородных газах и металлах. Результаты экспериментальных поисков ПФП. “Плазменность” обычных переходов газ-жидкость и связь с проблемой перехода металл-диэлектрик в парах металлов.

Условия одновременного химического, ионизационного и фазового равновесия в плотных нейтральных средах и неидеальной одноэлементной плазме и плазме химических смесей и компаундов. Правило Максвелла и правило двойной касательной. Условия Гиббса для нейтральных химически реагирующих смесей. Обобщенный (электрохимический) потенциал и условия Гиббса-Гуггенхейма для простой и многоэлементной плазмы в терминах квазихимического подхода.

- Неконгруэнтные фазовые переходы (НФП) в плазме смесей и химических соединений (компаундов). Особенности основных фазовых диаграмм НФП в интенсивных и экстенсивных термодинамических переменных. Разделение границ кипения жидкости и насыщения пара, границ плавления кристалла и замерзания жидкости. Фазовые переходы и полные фазовые диаграммы в уран-содержащих топливах современных и перспективных ядерных реакторов. Связь с проблемой безопасности ядерной энергетики.

- Ячеечное приближение для описания плотной и сверхплотной плазмы. Связь с вариационным принципом статистической механики. Описание электронной компоненты: модель Томаса-Фермии ее модификации для вырожденных электронов и приближение Пуассона-Больцмана – для невырожденных. Оболочечные эффекты. Модель Хартри-Фока-Слетера. Описание вклада ядерных степеней свободы. Модернизации ячейчного подхода. Модель осциллирующей ячейки. Модель “ограниченного атома”.

- Возможности и перспективы методов *ab initio* в описании термодинамики плотной неидеальной плазмы. Общая характеристика классических и квантовых методов Монте-Карло (MC) и Молекулярной Динамики (MD) в сочетании с Методом Функционала Плотности (DFT). Термодинамика плотного водорода в предсказании традиционных моделей и первопринципных подходов.

Самостоятельная работа включает в себя:

Успешное освоение курса требует напряжённой самостоятельной работы студента. В программе курса приведено минимально необходимое время для работы студента над темой.

- чтение и конспектирование рекомендованной литературы,
- проработку учебного материала (по конспектам лекций, учебной и научной литературе), подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения, доказательство отдельных утверждений, свойств;
- решение задач, предлагаемых студентам на лекциях;
- подготовку к практическим занятиям, коллоквиумам, экзамену.

Руководство и контроль за самостоятельной работой студента осуществляется в форме индивидуальных консультаций.

Показателем владения материалом служит умение решать задачи. Для формирования умения применять теоретические знания на практике студенту необходимо решать как можно больше задач. При решении задач каждое действие необходимо аргументировать, ссылаясь на известные теоретические сведения. Значительно облегчить решение задачи может хорошо выполненный чертёж, если он соответствует условию задачи.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Общая и прикладная физика Физтех-школа физики и исследований им. Ландау кафедра физики высоких плотностей энергии
курс:	1
квалификация:	магистр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Разработчик: И.Л. Иосилевский, д-р физ.-мат. наук, старший научный сотрудник

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
ОПК-1 Владеет системой фундаментальных научных знаний в области физико-математических наук	ОПК-1.1 Знает и способен использовать в профессиональной деятельности фундаментальные научные знания в области физико-математических наук
	ОПК-1.2 Способен обобщать и критически оценивать опыт и результаты научных исследований в области профессиональной деятельности
ОПК-2 Имеет представление об актуальных проблемах науки и техники в области своей профессиональной деятельности, способен на научном языке формулировать профессиональные задачи	ОПК-2.1 Имеет представление о современном состоянии исследований в рамках тематической области своей профессиональной деятельности
	ОПК-2.2 Способен оценивать актуальность исследований в области своей профессиональной деятельности и их практическую значимость
ОПК-3 Способен выбирать и (или) разрабатывать подходы к решению типовых и новых задач в области профессиональной деятельности, учитывая особенности и ограничения различных методов решения	ОПК-3.1 Способен анализировать задачу, планировать пути решения, предлагать и комбинировать способы решения
	ОПК-3.2 Способен использовать исследовательские методы при решении новых задач, применяя знания в различных областях науки (техники)
	ОПК-3.3 Владеет аналитическими и вычислительными методами решения, понимает и учитывает на практике границы применимости получаемых решений
ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты	ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели
	ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты
ПК-3 Способен профессионально работать с исследовательским и испытательным оборудованием (приборами и установками, специализированными пакетами прикладных программ) в избранной предметной области	ПК-3.1 Понимает принципы работы используемого оборудования (специализированных пакетов прикладных программ)
	ПК-3.2 Способен проводить эксперимент (моделирование) с использованием исследовательского оборудования (пакетов прикладных программ)
	ПК-3.3 Способен оценивать точность полученных экспериментальных (численных) результатов

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Модели расчета химического и ионизационного равновесия» обучающийся должен:

знать:

- ☐ фундаментальные понятия, законы, теории классической и современной физики плазмы и химической термодинамики;
- ☐ порядки фундаментальных физических величин, характерных для термодинамики вещества с высокой концентрацией энергии в состоянии многофазной, многокомпонентной химически активной плазмы;
- ☐ понимание современных проблем физики и химии вещества с высокой концентрацией энергии, и сопутствующих вычислительных математических проблем;
- ☐ понимать формы проявления различных фазовых превращений в термодинамике вещества с высокой концентрацией энергии; основные понятия термодинамики и физики плазмы;
- ☐ термодинамические функции, производящие термодинамический потенциалы, классификацию типов термодинамического равновесия, особенностей термического и калорического уравнений состояния, взаимосвязи аномалий термодинамических и гидродинамических процессов, специфику термодинамического описания адиабатических процессов и течений газоплазменных сред, виды фазовых состояний и опорных объектов на фазовых диаграммах вещества, типы фазовых превращений в газоплазменных средах.

уметь:

- ☐ абстрагироваться от несущественного при моделировании реальных физических ситуаций в проблемах энергетики и физики высоких плотностей энергии;
- ☐ пользоваться своими знаниями для решения фундаментальных и прикладных задач в области физики высоких плотностей энергии;
- ☐ делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- ☐ производить численные оценки по порядку величины;
- ☐ делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- ☐ видеть в прикладных задачах энергетики их главное физическое содержание;
- ☐ осваивать новые предметные области, теоретические подходы и вычислительные методики в термодинамике реагирующих кулоновских систем и вещества в экстремальных состояниях;
- ☐ эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов;
- ☐ решать простейшие задачи термодинамики и физики плазмы методом уравнений состояния и канонических преобразований наборов термодинамических неравенств; – использовать язык фазовых диаграмм для решения задач;
- ☐ использовать различные виды и определять тип кривых и поверхностей уравнений состояния вещества;
- ☐ уметь исследовать свойства устойчивости термодинамических сред по заданному уравнению состояний.

владеть:

- ☐ навыками освоения большого объема информации;
- ☐ навыками самостоятельной работы в лаборатории и Интернете;
- ☐ культурой постановки и численного моделирования задач в физике высоких плотностей энергии;
- ☐ практикой расчетно-теоретического метода исследования и решения теоретических и прикладных задач в физике высоких плотностей энергии;
- ☐ математическим аппаратом термодинамики, химической физики и физики плазмы, аналитическими методами исследования уравнения состояний и фазовых переходов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

1. Физическая и Химическая модели плазмы. Смысл термина. Примеры. Смысл идеальности и неидеальности в обоих случаях.
2. Полное выражение для свободной энергии многосортной системы. Структура идеальной части. Ноль отсчета энергии и учет термохимии взаимных превращений в квазихимическом представлении.

3. Внутренняя статсумма комплексных частиц. Выделение статсуммы возбуждения. Проблема ограничения ("обрезания") статсумм возбуждения комплексных частиц в плазме. История и современные подходы.
4. Полная система уравнений для расчета состава и термодинамических функции многокомпонентной неидеальной реагирующей плазмы с произвольной кратностью ионизации и структурой молекулярных реакций. Формальная эквивалентность описания химических реакций и реакций ионизации.
5. Термодинамика газоплазменного состояния в рамках приближения идеальной смеси с ионизацией и химическими превращениями. Понятие «полосы ионизации» и «полосы диссоциации» на примере ионизации и диссоциации водорода. Положение полос на фазовой диаграмме. Определяющие параметры.
6. Структура термического и калорического уравнений состояния при пересечении изолированной «полосы» реакции. Фактор сжимаемости (PV/RT) и внепоступательная часть вн.энергии ($U-3/2PV$) как характеристики термического и калорического уравнений состояния.
7. Термодинамика газоплазменного состояния в «вакуумном» пределе ($T \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow 0$) Химический потенциал как «управляющий параметр» в вакуумном пределе. Понятие о «лестнице» ионизации для давления и энергии. Понятие о «термодинамическом спектре» для дифференциальных термодинамических характеристик. Связь параметров лестницы ионизации с фундаментальными термохимическими константами вещества. Энергетическая Шкала вещества.
8. Профили термодинамических зависимостей в газоплазменной области и области конденсированного состояния. Понятие о «долине неидеальности» и ее газоплазменном и конденсированном «склонах». Триада: термическая ионизация, ионизация давлением и ионизация разрежением.
9. "Поправки на неидеальность" и каналы их влияния на термодинамику системы в формализме «химической модели». Связь с дилеммой подходов «метод смеси» и «метод исходных атомов» в химической термодинамике неидеальных нейтральных реагирующих систем.
10. Неидеальность в кулоновских системах. Определяющие безразмерные параметры неидеальности и вырождения. Стандартный вывод дебаевского приближения для многокомпонентной плазмы в химической модели. Простейшие коррекции дебаевского приближения
11. Условия термодинамической устойчивости. Выпуклость и вогнутость термодинамических потенциалов. Различия в зависимостях от экстенсивных и интенсивных термодинамических переменных. Локальные (дифференциальные) и полные (интегральные) условия потери термодинамической устойчивости для термодинамических потенциалов и их производных.
12. Условия термодинамической устойчивости в системе многих сортов частиц. Роль матрицы перехода $\partial^2 \ln \Omega / \partial n_i \partial n_j$. Нарушение устойчивости в простейших приближениях.
13. Дебаевское приближение. Смысл условия локальной электронейтральности на примере дебаевского экранирования. Дебаевский радиус r_D . Формулы для r_D , ϵ_F , ϵ_P , ϵ_U , $\epsilon_{\text{вн}}$, $\epsilon_{\text{вн}}$, $\epsilon_{\text{вн}}$ случае одно- и многократной ионизации. Область применимости.
14. Понятие о гипотетических «плазменных фазовых переходах» (ПФП). История и современные поиски в плотной плазме водорода, благородных газов и металлов. "Плазменность" обычных переходов газ-жидкость в металлах и связь с проблемой перехода металл-диэлектрик. Гипотеза Ландау-Зельдовича
15. Условия одновременного химического, ионизационного и фазового равновесия в плотных нейтральных средах и неидеальной одноэлементной плазме и плазме химических смесей и компаундов. Правило Максвелла и правило двойной касательной. Условия Гиббса для нейтральных химически реагирующих смесей.
16. Обобщенный (электрохимический) потенциал и условия Гиббса-Гуггенгейма для простой и многоэлементной плазмы в терминах квазихимического подхода
17. Понятие о неконгруэнтных фазовых переходах (NCPT - НФП) в плазме смесей и химических соединений (компаундов). Особенности основных фазовых диаграмм НФП в интенсивных и экстенсивных термодинамических переменных. Разделение границ кипения жидкости и насыщения пара, границ плавления кристалла и замерзания жидкости. Фазовые переходы и полные фазовые диаграммы в уран-содержащих топливах современных и перспективных ядерных реакторов. Связь с проблемой безопасности ядерной энергетики.
18. Ячеечное приближение для описания плотной и сверхплотной плазмы. Связь с вариационным принципом статистической механики. Описание электронной компоненты: модель Томаса-Фермии ее модификации для вырожденных электронов и приближение Пуассона-Больцмана – для невырожденных.

19. Оболочечные эффекты. Модель Хартри-Фока-Слетера. Описание вклада ядерных степеней свободы. Модернизации ячеечного подхода. Модель осциллирующей ячейки. Модель “ограниченного атома”

20. Возможности и перспективы методов *ab initio* в описании термодинамики плотной неидеальной плазмы. Общая характеристика классических и квантовых методов Монте-Карло (MC) и Молекулярной Динамики (MD) в сочетании с Методом Функционала Плотности (DFT). Термодинамика плотного водорода в предсказании традиционных моделей и первопринципных подходов.

Примеры экзаменационных билетов:

Билет №1

1. Полная система уравнений для расчета состава и термодинамических функции многокомпонентной неидеальной химически реагирующей плазмы продуктов экстремального нагрева ядерного топлива: - высокотемпературной смеси уран-кислород с учетом химических реакций и ионизации.

2. Локальные (дифференциальные) и интегральные условия потери термодинамической устойчивости. Выпуклость и вогнутость термодинамических потенциалов. Условия термодинамической устойчивости в системе многих сортов частиц.

Билет №2

1. Термодинамика газоплазменного состояния в «вакуумном» пределе ($T \rightarrow 0$, $\rho \rightarrow 0$). Понятие с «лестнице» ионизации и о «термодинамическом спектре» для дифференциальных характеристик. Понятие о «долине неидеальности» и трех типах: термической ионизации, ионизации давлением и ионизации разрежением.

2. Дебаевское приближение. Дебаевский радиус r_D . Формулы для r_D , $\square F$, $\square P$, $\square U$, $\square \square \square$, $\square \square$, \square случае одно- и многократной ионизации. Область применимости Дебаевского приближения.

Критерии оценивания

Оценка за экзамен:

За первое задание студент получает от 0 до 4 баллов, за второе и третье – от 0 до 3 баллов за каждое в зависимости от полноты представленного ответа (решения). Количество набранных баллов определяет оценку за экзамен:

Оценка Набранные баллы

отлично (10) более 9

отлично (9) от 8 до 9 включительно

хорошо (8) от 7 до 8 включительно

хорошо (7) от 6 до 7 включительно

хорошо (6) от 5 до 6 включительно

удовлетворительно (5) от 4 до 5 включительно

удовлетворительно (4) от 3 до 4 включительно

удовлетворительно (3) от 2 до 3 включительно

неудовлетворительно (2) от 1 до 2 включительно

неудовлетворительно (1) не более 1

Оценка «отлично (10)» выставляется обучающемуся, если он показал всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений;

оценка «отлично (9)» выставляется обучающемуся, если он показал всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений, но при этом были допущены небольшие неточности, которые были самостоятельно обнаружены и исправлены;

оценка «отлично (8)» выставляется обучающемуся, если он показал всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений, но при этом были допущены небольшие неточности, которые после указания экзаменатора были самостоятельно исправлены;

оценка «хорошо (7)» выставляется обучающемуся, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает неточности в ответе или делает несущественные ошибки при решении задач;

оценка «хорошо (6)» выставляется обучающемуся, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает небольшие ошибки в ответе и (или) при решении задач;

оценка «хорошо (5)» выставляется обучающемуся, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но отвечает неуверенно и (или) допускает ошибки при решении задач;

оценка «удовлетворительно (4)» выставляется обучающемуся, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, неточные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, если при этом он владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации;

оценка «удовлетворительно (3)» выставляется обучающемуся, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, неточные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, не владеющему некоторыми разделами учебной программы, но умеющему применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации;

оценка «неудовлетворительно (2)» выставляется обучающемуся, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных понятий дисциплины и не умеет использовать полученные знания при решении типовых практических задач;

оценка «неудовлетворительно (1)» выставляется обучающемуся, показавшему полное незнание учебной программы дисциплины.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не превышает двух часов. Во время проведения экзамена (зачета) обучающиеся могут пользоваться программой дисциплины, а также конспектом лекций и учебными пособиями по курсу.