

Фундаментальная функциональная форма термического уравнения состояния

© Умирзаков Ихтиёр Холмаматович

Лаборатория моделирования. ФГБУН «Институт теплофизики СО РАН». пр-т Лаврентьева, 1.

г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

Ключевые слова: уравнение состояния, кулоновское притяжение, кулоновское отталкивание, теорема вириала, квантовое состояние, нерелятивистский случай.

Аннотация

Рассмотрена электрически нейтральная система, состоящая из конечного числа электронов, являющихся фермионами, и ядер, являющихся фермионами или бозонами. При этом подсистема ядер может состоять из одинаковых ядер, что соответствует системе, состоящее из атомов одного химического элемента, подсистема также может содержать различные типы ядер, что соответствует системе, состоящей из одинаковых молекул, смеси (раствору, сплаву и т.п.) различных веществ, плазме различных степеней ионизации, химически реагирующей системе. Движение электронов и ядер описывается в рамках нерелятивистской квантовой механики с учетом спинов электронов и ядер. Учитывается только кулоновское взаимодействие электронов с электронами и ядрами и ядер друг с другом. Влиянием релятивистских эффектов на взаимодействие электронов с электронами и ядрами и ядер друг с другом пренебрегается. Используя теорему вириала получена фундаментальная функциональная форма термического уравнения состояния реальных веществ, их смесей, растворов и сплавов. Показано, что: уравнение состояния состоит из суммы неотрицательной и неположительной функций от термодинамических параметров; неотрицательная функция определяется усреднением по квантовым состояниям энергии кулоновского притяжения между электронами и ядрами, а положительная функция – усреднением суммы кинетической энергии электронов и ядер, энергии отталкивания электронов друг от друга и энергии отталкивания ядер друг от друга; в каждом квантовом состоянии невозможно отделить кулоновское притяжение от кулоновского отталкивания, поэтому принципиально невозможно отделить кулоновское притяжение от кулоновского отталкивания в термическом уравнении состояния; последнее утверждение верно и в том случае, если движение ядер описывается законами классической механики.