Краткая информация о проекте

Наименование	ИРН AP23487020 «Состав разогретого плотного вещества в рамках обобщенной химической модели плазменной среды»
Актуальность	Химическая модель плотного разогретого вещества сохраняет высокую актуальность благодаря своей способности адекватно описывать термодинамические и транспортные свойства систем, находящихся в условиях высоких температур и давлений, где вещество представляет собой смесь атомов, ионов, молекул и электронов в состоянии частичной ионизации. В отличие от полностью ионизованных плазменных моделей, она учитывает процессы диссоциации, ионизации и рекомбинации, что делает её особенно востребованной при моделировании астрофизических объектов, инерциального термоядерного синтеза, а также в задачах высокоэнергетической плотной физики и материаловедения.
Цель	Целью проекта является исследование состава разогретого плотного вещества на основе разработанной ранее обобщенной химической модели, позволяющей аналитически рассчитать ионизацию и диссоциацию давлением, решить проблему расходимости внутренней статической суммы составных частиц, а также уточнить границы существования плазменного фазового перехода.
Задачи	1. Состав разогретого плотного вещества в рамках обобщенной химической модели многокомпонентной плазменной среды 1.1 Получение выражения для свободной энергии многокомпонентной смеси, которое включает в себя микроскопические потенциалы взаимодействия, учитывающие квантовые эффекты дифракции и симметрии, конечность размеров составных частиц, а также их электрическую поляризуемость 1.2 Определение физических условий на диаграмме плотности и температуры, при которых наступает ионизация давлением 1.3 Определение физических условий на диаграмме плотности и температуры, при которых наступает диссоциация давлением 2. Регуляризация внутренней статистической суммы составных частиц 2.1 Обрезание внутренней статистической суммы для идеальной системы невзаимодействующих составных частиц 2.2 Определение набора критических квантовых чисел возбужденных энергетических уровней, заселенность которых отлична от нуля 2.3 Расчет распределения заселенностей возбужденных энергетических уровней в зависимости от концентрации и температуры плазменной среды 3. Уточнение условий плазменного фазового перехода 3.1 Получение выражения для свободной энергии многокомпонентной смеси водорода и дейтерия, которое включает в себя микроскопические потенциалы взаимодействия, учитывающие квантовые эффекты дифракции и симметрии, конечность размеров атомов и ионов, а также их взаимное притяжение в рамках атом-

	атомного приближения 3.2 Расчет изотерм и адиабат Гюгонио для смеси водорода и дейтерия, а также их сравнение с результатами компьютерного моделирования 3.3 Уточнение границ плазменного фазового перехода, связанное с сильными корреляциями между заряженной и нейтральной компонентами плазменной среды
Ожидаемые и достигнутые результаты	• **за 2024 год:** Проведен анализ состава разогретого плотного вещества для определения параметров плазменной среды. Получена свободная энергия Гельмгольца смеси свободных электронов и ионов, атомов и молекул с межчастичными потенциалами взаимодействия, учитывающими квантовые эффекты дифракции и симметрии, конечность размеров составных частиц, а также их электрическую поляризуемость. Рассчитана кривая на диаграмме плотности и температуры, соответствующая процессу ионизации давлением. Рассчитана кривая на диаграмме плотности и температуры, соответствующая процессу диссоциации давлением. • **за 2025 год:** Изучены возможные способы регуляризации внутренней статистической суммы составных частиц. Рассчитано распределение заселенностей частиц по возбужденным уровням при различных значениях плотности и температуры для идеальной системы невзаимодействующих составных частиц. Получена зависимость критических квантовых чисел, заселенность которых обращается в ноль, как функции температуры и плотности среды при условии наличия взаимодействия между частицами. Рассчитано распределение заселенностей возбужденных энергетических уровней как функция температуры и плотности среды при условии наличия взаимодействия между частицами. • **за 2026 год:** будет сделано сравнение химических моделей для расчета параметров плазменного фазового перехода. По результатам проделанных работ за все три года будут опубликованы не менее 3 (трех) статей и (или) обзоров в рецензируемых научных изданиях по научному направлению проекта, индексируемых в Science Citation Index Expanded и входящих в 1 (первый), 2 (второй) и (или) 3 (третий) квартиль по импакт-фактору в базе Web of Science и (или) имеющих процентиль по CiteScore в базе Scopus не менее 60 (шестидесяти); не менее 1 (одной) статьи или обзора в рецензируемом зарубежном или отечественном издании, рекомендованном КОКНВО; - либо не менее 2 (двух) статей и (или) обзоров в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в Science Citation Index Expanded и входящих в 1 (первый) и (или) 2 (второй) квартиль по импакт-фактору в базе Web of Science и (или) имеющих процентиль по CiteScore в базе Scopus не менее 70 (семидесяти); - либо не менее 1 (одной) статьи или обзора в рецензируемом научном издании, индексируемом в Science Citation Index Expanded и входящем в 1 (первый) квартиль в базе Web of Science или

	имеющем процентиль по CiteScore в базе Scopus не менее 90 (девяносто)
Имена и фамилии членов исследовательской группы с их идентификаторами (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID, при наличии) и ссылками на соответствующие профили	Научный руководитель – Давлетов Аскар Ербуланович (**Researcher ID:** O-1078-2014, **ORCID ID:** 0000-0003-0007-968, **Scopus ID**: 6602642543), доктор физико-математических наук, профессор; Ткаченко И.М. (**Researcher ID:** A-4125-2015, **ORCID ID:** 0000-0001-8767-0581, **Scopus ID**: 7006413551); Архипов Ю.В. (**Researcher ID:** N-4833-2014, **ORCID ID:** 0000-0002-7299-5452**, Scopus ID**: 6603726292) Мухаметкаримов Е.С. (**Researcher ID:** N-6833-2017, **ORCID ID:** 0000-0003-1381-4532, **Scopus ID**: 55700980900) Еримбетова Л.Т. (**Researcher ID:** O-2204-2014, **ORCID ID:** 0000-0003-3498-8216, **Scopus ID**: 55702201200) Кисан А. (**Researcher ID:** P-7952-2014, **ORCID ID:** 0000-0002-8841-6902, **Scopus ID**: 57204819851)
Использование	Использование химической модели позволяет более точно рассчитывать уравнения состояния, фазовые переходы и оптические свойства вещества в широком диапазоне параметров, что критически важно для интерпретации экспериментальных данных и разработки новых технологий.
Приоритет в сравнении с реальными аналогами	Химическая модель плотного разогретого вещества обладает приоритетом по сравнению с альтернативными подходами благодаря способности обеспечивать аналитическое описание свойств системы в области частичной ионизации, где простые замкнутые формулы, как правило, отсутствуют. В отличие от громоздких численных методов, требующих значительных вычислительных ресурсов, она позволяет получать компактные аналитические зависимости для уравнений состояния, состава и термодинамических характеристик, сохраняя при этом физическую наглядность и интерпретируемость результатов. Это делает модель особенно ценной для теоретического анализа, быстрой оценки параметров и включения в более сложные многоуровневые расчётные схемы.
Список публикаций с ссылками на них	1. A.E. Davletov, Yu.V. Arkhipov, Ye.S. Mukhametkarimov, L.T. Yerimbetova, I.M. Tkachenko. Warm dense matter composition within the framework of the generalized chemical model of a multicomponent plasma medium // Physics of non-Ideal Plasma 18 (PNP 18), September 17, 2024. – https://indico.cern.ch/event/1437801/contributions/6134220/ 2. A.E. Davletov, L.T. Yerimbetova, Ye.S. Mukhametkarimov, I.M. Tkachenko, A. Kissan. Mott transition in a multicomponent plasma under warm dense matter conditions // International Scientific Research Forum in honor of 90th anniversary of Al-Farabi Kazakh National University. – 26-28 September 2024. – C. 77 3. Yerimbetova L.T., Davletov A.E., Mukhametkarimov Ye.S., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Ionization potential lowering in the framework of the generalized chemical model // IV annual conference of Kazakh Physical Society, Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, June 4 – 7, 2025 – P. 123-124 4. Yerimbetova L.T., Davletov A.E., Mukhametkarimov Ye.S., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Ionization and

	Partition Function Regularization in Multicomponent Warm Dense Matter // Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS 2025), Tahoe Blue Event Center in Stateline, Nevada, USA, July 27 – 31, 2025. – No. 27; 5. Yerimbetova L.T., Davletov A.E., Mukhametkarimov Ye.S., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Multicomponent plasma composition under warm dense matter conditions: a generalized chemical model approach // 11th International conference on Plasma Physics and Plasma Technology (PPPT-11), Minsk, Belarus, September, 15-19, 2025. – P. 20 6. Yerimbetova L. T., Arkhipov Yu. V., Mukhametkarimov Ye. S., Davletov A. E., Tkachenko I. M. Generalized Chemical Model for Warm Dense Hydrogen: Ionization Potential Depression and Molecular Dissociation Shifts // Contributions to Plasma Physics – 2025. – Art. No. e70065 (10 p.) – https://doi.org/10.1002/ctpp.70065
Информация о патентах	Нет