

УДК 533.9, 621.039; 51-73; 51-74; 517.958:536

Описание термодинамических свойств плазмы в приближениях Саха и Томаса–Ферми

В. В. Кузенов, В. В. Шумаев

В работе выполнено сравнение зависимостей давления P , удельной внутренней энергии E , удельной энтропии S и степени ионизации \bar{Z} от температуры T для плазмы смеси углекислого газа и ксенона, полученных на основе моделей ионизационного равновесия Саха и Томаса–Ферми в области их совместной применимости: $10^4 < T < 10^6$ К, $10^{-7} < \rho < 10^{-1}$ г/см³.

PACS: 52.25.Fi, 52.25.Kn, 52.25.Xz, 52.55.-s, 52.65.-y

Ключевые слова: модель Томаса–Ферми, модель Саха, термодинамические свойства, уравнения состояния.

Введение

Математическое моделирование взаимодействия мощного лазерного излучения с плазмой замагниченной мишени должно учитывать расчет уравнений состояний вещества, электромагнитные процессы, протекающие в плазменных астрофизических объектах, термоядерной плазме и области её окружающей, перенос широкополосного и лазерного излучения, расчет термодинамических и транспортных свойств плазмы, состоящей из смеси веществ, в широком диапазоне температур и плотностей. Важной спецификой данной задачи является влияние магнитного поля (в процессе сжатия мишени оно может достигать величин порядка 10^4 Тл [1, 2]) на физические процессы, протекающие в плазме мишени. Выполненные авторами работы оценки [3–6] показали, что магнитное поле с такой индукцией оказывает влияние только на транспортные свойства плазмы, но не изменяет вид внутренних оболочек атомов и ионов.

Для описания термодинамических свойств плазмы в области высоких температур и плотностей (температуры $T > 10^5$ К, плотности порядка плотности твердого тела и выше) обычно применяется модель Томаса–Ферми [7–11]. Для более низких температур и плотностей используется мо-

дель ионизационного равновесия (модель Саха) [12–14].

Переходная область термодинамических параметров 10^4 К $< T < 10^6$ К, $10^{-7} < \rho < 10^{-1}$ г/см³ описывается как моделью Саха, так и моделью Томаса–Ферми [7, 8, 14]. При этом известно, что вещество при указанных параметрах удовлетворяет условиям локального термодинамического равновесия [7, 8]. Поиск области количественной близости (области совместной применимости) моделей Саха и Томаса–Ферми для более простого случая индивидуальных веществ (фтора, азота и кислорода) проведен в [15].

В данной работе поиск области совместной применимости проводится для смеси веществ: 50 % углекислого газа (CO₂) и 50 % ксенона (Xe). Для этой цели с помощью обеих моделей выполнены расчеты и проведено сравнение полного давления P , удельной внутренней энергии E , удельной энтропии S и степени ионизации $\bar{Z} = n_e/n$.

Модель ионизационного равновесия

В модели ионизационного равновесия Саха предполагается достаточная разреженность исследуемого газа, а также возможность применимости статистики Больцмана к системе "связанных" электронов [7]. Будем считать также, что энергетические затраты на излучение не сказываются заметно на состоянии ионизационного равновесия.

Для расчета состава однокомпонентной плазмы и определения степени ионизации \bar{Z} решается система уравнений Саха–Эккерта (1) с учетом неидеальности (3), условий нормировки и квазинейтральности (4):

$$\frac{n_{m+1}n_e}{n_m} = 2 \frac{\sum_{m+1}}{\sum_m} \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{I_{m+1}^*}{kT}\right). \quad (1)$$

Кузенов Виктор Витальевич, доцент.

Шумаев Вячеслав Витальевич, аспирант.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана».

Россия, 105005, Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1.

Тел. 8 (499) 263-65-70.

E-mail: shumaev@student.bmstu.ru

Статья поступила в редакцию 3 марта 2015 г.

© Кузенов В. В., Шумаев В. В., 2015

$$\Sigma_m = g_{z0} + g_{z1} \cdot \exp\left(-\frac{w_{z1}}{kT}\right) + g_{z2} \cdot \exp\left(-\frac{w_{z2}}{kT}\right) + \dots \quad (2)$$

$$I_{m+1}^* = I_{m+1} - \Delta I_{m+1} = I_{m+1} - \frac{Z_{m+1} \cdot e^2}{r_D}, \quad r_D = \sqrt{\frac{kT}{n_e e^2}} \quad (3)$$

$$\sum_m n_m = n_0, \quad \sum_m m n_m = n_e, \quad \bar{Z} = \frac{n_e}{n_0} \quad (4)$$

где n_{m+1} , n_m — концентрация ионов с зарядом $m+1$ и m соответственно; Σ_m , Σ_{m+1} — статистические суммы; m_e — масса электрона; h — постоянная Планка; I_{m+1}^* , I_{m+1} — энергия ионизации с кулоновской поправкой и без неё; $Z_{m+1} = m+1$ — заряд иона; r_D — радиус Дебая, g_{zi} — статистические веса энергетических состояний.

При этом согласно [7, 14], производится "обрезание" статистических сумм атомов и ионов (2), т. е. предлагается проводить расчет этих статсумм до уровня с энергией ионизации, не превышающей kT . Отметим, что использованный в работе способ обрезания статистических сумм не приводит к заметным погрешностям в определении состава плазмы в диапазоне изменения параметров $10^4 \text{ K} < T < 10^6 \text{ K}$, $10^{-7} < \rho < 10^{-1} \text{ г/см}^3$.

Для определения степени ионизации удобно воспользоваться компенсированной моделью ионизационного равновесия [13], в которой снижение потенциала ионизации ΔI_{m+1} (поправка на неидеальность, вызванная взаимодействием частиц плазмы) компенсируется поправкой $-\delta I_{m+1}$, связанной с обрезанием статсумм. Главным преимуществом данного подхода является простота численной реализации. Степень ионизации в таком методе находится на основе численного метода половинного деления [12, 13]. Для этого система уравнений Саха формулируется в виде одного уравнения $\chi_e = f(\chi_e)$. Здесь χ_e — относительная концентрация электронов, $f(\chi_e)$ — некая функция от χ_e .

Полное (электронное P_e и ионное P_i) давление ионизованного газа вычисляется как сумма парциальных давлений атомов и электронов [7]:

$$P = P_e + P_i = N\rho(1 + \bar{Z})kT, \quad (5)$$

где N — число атомов; ρ — плотность ионизованного газа; k — постоянная Больцмана; T — температура.

Удельная внутренняя энергия ионизованного газа представляется как сумма внутренних энергий атомов и электронов с учетом энергии ионизации и электронного возбуждения [7]:

$$E = \frac{3}{2} N(1 + \bar{Z})kT + N \sum_m Q_m \alpha_m + N \sum_m W_m \alpha_m, \quad (6)$$

где Q_m — энергия, отрыва от атома m электронов; α_m — концентрация ионов с зарядом, равным m ; W_m — энергия электронного возбуждения.

Область применимости модели Саха ограничивается проявлением эффектов сильной неидеальности плазмы при высоких плотностях ($\rho \sim 10^{-1} \text{ г/см}^3$) и низких температурах ($T \sim 10^4 \text{ K}$), а также эффектами нарушения локального ионизационного равновесия при низких плотностях ($\rho \sim 10^{-7} \text{ г/см}^3$) и достаточно высоких температурах ($T \leq 10^6 \text{ K}$) [7, 14]. Критерием, определяющим степень неидеальности плазмы, является условие малости энергии кулоновского взаимодействия заряженных частиц по сравнению с их кинетической энергией, что совпадает с условием применимости дебаевского приближения — число заряженных частиц в сфере радиуса r_D должно быть достаточно велико [7, 14]:

$$N_D = \frac{4}{3} \pi r_D^3 (n_e + n_0) \gg 1. \quad (7)$$

Квантово-статистическая модель

Модель Томаса–Ферми имеет следующие предположения физической постановки [3, 7, 8]: плазма рассматривается как система атомных ячеек сферической формы. В модели газ считается состоящим из ядер и электронов. Ядра подчиняются статистике Больцмана и вносят свой вклад в уравнения состояния. Электроны рассматриваются как газ, находящийся в самосогласованном электростатическом поле. Электроны подчиняются статистике Ферми–Дирака.

Рассматривается смесь из N компонент при заданной температуре $\theta = k_B T$ (k_B — постоянная Больцмана) и средней плотности ρ . Вещество рассматриваем как сумму сферических атомных ячеек радиусов r_{0i} , состоящих из ядер (подчиняющихся статистике Больцмана) и электронов (подчиняющихся статистике Ферми–Дирака). В условиях термодинамического равновесия систем их химические потенциалы μ_i должны быть равны.

Вычисление потенциала Томаса–Ферми для различных ячеек смеси сводится к решению системы нелинейных дифференциальных уравнений 2-го порядка с соответствующими граничными условиями [8]:

$$\frac{d^2}{dx^2} \phi_i(x) = a_i x I_{1/2} \left(\frac{\phi_i}{x} \right), \quad (i = 1, 2, \dots, N), \quad (8)$$

$$\phi_i(0) = \frac{Z_i}{\theta r_{0i}}, \quad \phi_i(1) = \frac{d\phi_i}{dx} \Big|_{x=1} = \frac{\mu_i}{\theta} = -\eta_i, \quad (9)$$

$$\text{Здесь } x = \frac{r}{r_{0i}}, \quad \frac{\phi_i(x)}{x} = \frac{V_i(r) + \mu_i}{\theta}, \quad (10)$$

$$a_i = \frac{4\sqrt{2\theta}}{\pi} r_{0i}^2, \quad r_{0i} = 1,388 \left(\frac{A_i}{\rho_i} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (11)$$

$$I_{1/2}(x) = \int_0^\infty \frac{y^2 dy}{1 + \exp(y-x)} \quad \text{— функция Ферми–}$$

Дирака, $y = p^2 / \theta$, A_i, Z_i — атомный вес и атомный номер i -ой компоненты. Радиусы r_{0i} и связанные с ними парциальные плотности ρ_i в ходе получения решения подбираются таким образом, чтобы удовлетворять следующим соотношениям:

$$\frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^N m_i = \sum_{i=1}^N \frac{m_i}{\rho_i}, \quad \eta_i = \eta_j = \eta = -\frac{\mu}{\theta}, \quad \forall i, j. \quad (12)$$

Методика вычисления давления, удельной внутренней энергии и удельной энтропии одного вещества описана в работах [8, 11, 15]. Для смеси вклад ионов рассчитывается так же, как и в случае одного вещества, но со средним зарядовым \bar{Z} и массовым \bar{A} числами. Здесь $\bar{Z} = \sum_i x_i \cdot Z_i$,

$\bar{A} = \sum_i x_i \cdot A_i$; x_i, Z_i, A_i — числовая доля, заряд и атомный вес i -ого вещества. При расчете вклада электронов парциальные плотности ρ_i подбираются таким образом, чтобы удовлетворить условиям (12). Термодинамические функции электронной компоненты смеси находятся суммированием значений для каждого элемента по алгоритмам для одного вещества (при этом используются парциальные плотности ρ_i), причём к каждому такому значению добавляется весовой коэффициент $m_i = x_i \cdot A_i / \bar{A}$, соответствующий массовой доле.

Область применимости модели Томаса–Ферми определяется, в основном, двумя факторами: параметром вырождения и параметром неидеальности. Принято считать [7–11], что плазма будет являться вырожденной и неидеальной, если $\Gamma > 1$ и $\xi > 1$. Кроме этого, следует отметить, что данная модель работает тогда, когда малы квантовые и обменные поправки к ней [11]: модель Томаса–Ферми начинает давать удовлетворительные результаты при любых концентрациях частиц, начиная с температуры $T > 3 \cdot 10^4$ К.

Параметр вырождения определяется как число частиц в сфере радиуса длины волны де Бройля для электрона

$$\xi = n_e \cdot \lambda_e^3, \quad (13)$$

где $\lambda_e = (h^2 / 2\pi m_e T)^{1/2}$ — длина волны де Бройля для электрона. Параметр неидеальности, который определяется как отношение энергии кулоновского взаимодействия электронов к их кинетической энергии, выражается в виде

$$\Gamma = \frac{e^2 n_e^{1/3}}{E_k}. \quad (14)$$

где n_e, E_k — концентрация и кинетическая энергия электронов. Если электроны подчиняются статистике Больцмана, то $E_k \sim T$. Для вырожденного электронного газа $E_k \sim \hbar^2 n_e^{2/3} / (2m_e)$.

В данной работе рассматриваются плазма в следующем диапазоне термодинамических параметров: $10^4 < T < 10^6$ К, $10^{-7} < \rho < 10^{-1}$ г/см³. Оценки показывают, что для данного диапазона параметров плазма является вырожденной и неидеальной, т. е. при малых плотностях и температурах параметры $\Gamma > 1$ и $\xi > 1$. В таком диапазоне параметров модель ионизационного равновесия Саха приводит к большим ошибкам, но при этом применение квантово-статистической конечно-температурной модели Томаса–Ферми оправдано.

Результаты расчета

На рисунках ниже приведены результаты расчетов, которые выполнены с использованием моделей Саха и Томаса–Ферми. На рисунках показаны графические зависимости давления и удельной внутренней энергии от температуры и плотности для смеси CO₂+Xe (рис. 1 и рис. 2). Также приведены зависимости от температуры относительной погрешности Δ результатов расчета давления, удельной внутренней энергии и энтропии, а также степени ионизации (рис. 3). При этом под относительной погрешностью Δ результатов расчетов, выполненных с помощью модели Саха и Томаса–Ферми, понимается следующее выражение:

$$\Delta = \frac{|P_{TF} - P_{Саха}|}{0,5 \cdot (P_{TF} + P_{Саха})}, \quad \%, \quad (15)$$

где $P_{TF}, P_{Саха}$ — значение одного из четырех параметров (\bar{Z}, P, E, S), определяемых на основе моделей Томаса–Ферми и Саха соответственно.

Расчет по модели Томаса–Ферми выполнен авторами в [3, 6, 15], значения степени ионизации и термодинамические функции по модели Саха взяты из таблиц [16].

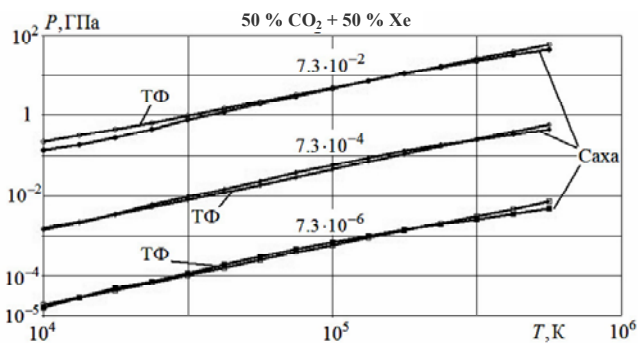


Рис. 1. Давление смеси CO_2+Xe в зависимости от температуры, рассчитанное по моделям Саха и Томаса–Ферми. Цифрами на графиках обозначена средняя плотность смеси в $г/см^3$

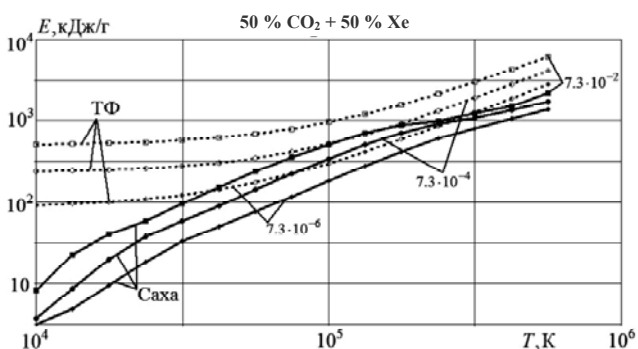


Рис. 2. Зависимость удельной внутренней энергии от температуры при разных плотностях смеси

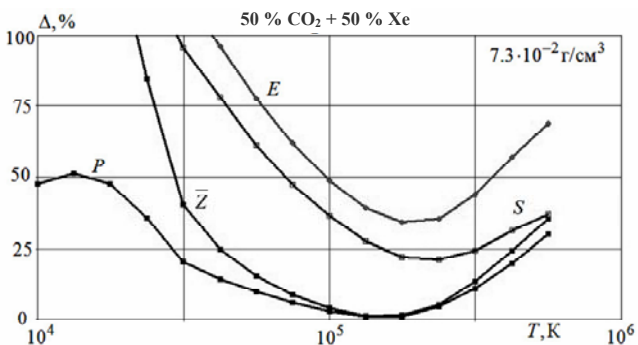


Рис. 3. Относительная погрешность Δ результатов расчета по моделям Саха и Томаса–Ферми в зависимости от температуры для смеси CO_2+Xe при средней плотности $7,3 \cdot 10^{-2} г/см^3$

Из рисунков следует, что при температурах $10^4—5 \cdot 10^4$ К наблюдается значительная (на порядок величины) разница между результатами расчета по моделям Томаса–Ферми и Саха. Эта разница объясняется тем, что термодинамические параметры, полученные по модели Томаса–Ферми, имеют заметную ошибку в данном диапазоне температур [7—11]. При этом в области температур $T \sim 10^5$ К обе модели показывают качественно сходные результаты, однако величина относительной погрешности Δ незначительно возрастает при $T \sim 10^6$ К.

Заключение

Для смеси 50 % CO_2 и 50 % Xe на основе результатов проведенных расчетов выполнен поиск области совместной применимости моделей Саха и Томаса–Ферми. Установлено, что при температуре $T \sim 10^5$ К обе модели показывают сходные результаты, однако при низких температурах наблюдается значительное расхождение в результатах, объясняемое попаданием модели Томаса–Ферми в область своей плохой применимости. Большие относительные погрешности результатов расчета внутренней энергии и энтропии могут объясняться следующими обстоятельствами: во-первых, особенностью численной реализации метода Томаса–Ферми — внутренняя энергия и энтропия определяются с меньшей точностью, чем давление и степень ионизации; во-вторых, таблицы [16] обеспечивают высокую точность (в сравнении с экспериментальными данными) только для области слабо неидеальной плазмы, в которую рассматриваемая смесь практически не попадает; в-третьих, в модели Саха учитывались энергии возбуждения только первых четырех уровней каждого иона, а также не учитывалась энергии испарения и полной диссоциации молекул. При этом точность модели Томаса–Ферми увеличивается с ростом температуры, поскольку квантовые и обменные поправки к данной модели обратно пропорциональны температуре [8]. Поэтому увеличение относительной погрешности в диапазоне $3 \cdot 10^5—10^6$ К [17], вероятно, связано со снижением точности модели Саха, которая подходит к границе своей применимости.

Работа выполнена в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки Российской Федерации № 13.79.2014/К.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gotchev O. V., Chang P. Y., Knauer J. P., et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. P. 215004.
2. Nakamura D., Sawabe H., Takeyama S. // Rev. Sci. Instrum. 2014. V. 85. P. 036102.
3. Кузенов В. В., Рыжков С. В., Шумаев В. В. // Прикладная физика. 2014. № 3. С. 22.
4. Kuzenov V. V., Ryzhkov S. V. // Problems of Atomic Science and Technology. 2013. No. 1 (83). P. 12.
5. Рыжков С. В. // Известия РАН. Серия Физическая. 2014. Т. 78. № 5. С. 647.
6. Kuzenov V. V., Ryzhkov S. V. // Problems of Atomic Science and Technology. 2013. No. 4 (86). P. 103.
7. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных явлений гидродинамических явлений. — М.: Наука, 1966.
8. Никуфоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Кван-

тово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. — М.: Физматлит, 2000.

9. Киржниц Д. А. // ЖЭТФ. 1958. Т. 35. № 6. С. 1545.
10. Киржниц Д. А., Шпатаковская Г. В. // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 6. С. 2082.
11. Dyachkov S., Levashov P. // Phys. Plasmas. 2014. V. 21. No. 5. P. 052702.
12. Калиткин Н. Н., Луцкий К. И. // ДАН. 2014. Т. 457. № 2. С. 157.
13. Калиткин Н. Н., Козлитин И. А. // Математическое моделирование. 2008. Т. 20. № 4. С. 69.

14. Бойко Ю. В. и др. Термодинамические и оптические свойства ионизованных газов при температурах до 100 эВ: Справочник. — М.: Энергоатомиздат. 1988.

15. Кузенов В. В., Рыжков С. В., Шумаев В. В. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т. 15. Вып. 5.
16. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В., Rogov V. S. Таблицы термодинамических функций и транспортных коэффициентов плазмы. — М.: Изд. ИПМ АН СССР, 1972.
17. Кузенов В. В., Рыжков С. В., Фролко П. А. // Прикладная физика. 2015. № 2. С. 21.

Description of the thermodynamic properties of plasma in Saha and Thomas–Fermi models

V. V. Kuzenov and V. V. Shumaev

Bauman Moscow State Technical University
5/1 2-nd Baumanskaya str., Moscow, 105005, Russia
E-mail: shumaev@student.bmstu.ru

Received March 3, 2015

The pressure P , the specific internal energy E , the specific entropy S and the degree of ionization depending on the temperature T are obtained for the plasma of CO_2+Xe mixture on the basis of the model of ionization equilibrium (Saha model) and the Thomas–Fermi model. These results are compared in the region where the both models work: $10^4 < T < 10^6$ K, $10^{-7} < \rho < 10^{-2}$ g/cm³.

This research has been financially supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation, Project No. 13.79.2014/K.

PACS: 52.25.Fi, 52.25.Kn, 52.25.Xz, 52.65.-y

Keywords: Thomas-Fermi model, Saha model, thermodynamic properties, equations of state.

REFERENCES

1. O. V. Gotchev, P. Y. Chang, J. P. Knauer, et al., Phys. Rev. Lett. **103**, 215004 (2009).
2. D. Nakamura, H. Sawabe, and S. Takeyama, Rev. Sci. Instrum. **85**, 036102 (2014).
3. V. V. Kuzenov, S. V. Ryzhkov, and V. V. Shumaev, Prikladnaya Fizika, No. 3, 22 (2014).
4. V. V. Kuzenov and S. V. Ryzhkov, Problems of Atomic Science and Technology. 2013. No. 1 (83). P. 12.
5. S. V. Ryzhkov, Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys. **78**, 647 (2014).
6. V. V. Kuzenov and S. V. Ryzhkov, Problems of Atomic Science and Technology. 2013. No. 4 (86). P. 103.
7. Ya. B. Zeldovich and Yu. P. Raizer, *Physics of Shocks Waves* (Nauka, Moscow, 1966) [in Russian].
8. A. F. Nikiforov, V. G. Novikov, and V. B. Uvarov, *Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter. Methods for Computation Opacity and Equation of State* (Birkhauser Verlag, Basel, 2005).
9. D. A. Kirzhnits, J. Exp. Theor. Phys. **35**, 1545 (1958).
10. D. A. Kirzhnits and G. V. Shpatovskaya, J. Exp. Theor. Phys. **62**, 2082 (1972).
11. S. Dyachkov and P. Levashov, Phys. Plasmas **21**, 052702 (2014).
12. N. N. Kalitkin and K. I. Lutskii, Dokl. Ross. Akad. Nauk **457** (2), 157 (2014).
13. N. N. Kalitkin and I. A. Kozlitin, Mathematical Models and Computer Simulations **1** (4), 200 (2009).
14. Yu. V. Boiko et al., *Thermodynamic and Optic Features of Ionized Gases at Temperature below 100 eV. Handbook*. (Energoatomizdat, Moscow, 1988) [in Russian].
15. V. V. Kuzenov, S. V. Ryzhkov, and V. V. Shumaev, *Physical-Chemical Kinetics in Gas Dynamics* **15** (5), (2014).
16. N. N. Kalitkin, L. V. Kuzmina, and V. S. Rogov, *Tables of Thermodynamic Functions and Transport Coefficients of Plasma*. (IPM RAN, Moscow, 1972) [in Russian].
17. V. V. Kuzenov, S. V. Ryzhkov, and P. A. Froloko, Prikladnaya Fizika, No. 2, 21 (2015).