

**Научно-координационная сессия  
«Исследования неидеальной плазмы»  
Москва, 4-5 декабря 2007**

---

**О моделировании  
термодинамических характеристик  
плотной плазмы многозарядных ионов  
на основе химической модели**

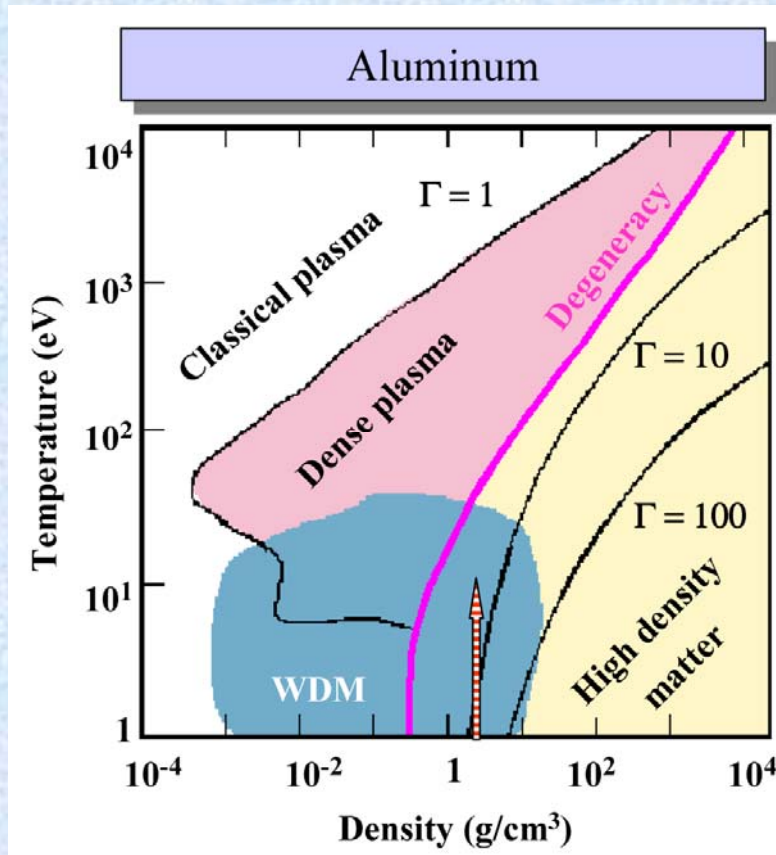
**П.А. Лобода, А.А. Шадрин, В.В. Попова**

**РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск**

# Основные проблемы при описании термодинамики плотной равновесной плазмы многозарядных ионов из “первых принципов”

1. Прямые экспериментальные данные для  $P(T, \rho)$ ,  $E(T, \rho)$  отсутствуют.
2. Плазма представлена многоэлектронными ионами с незаполненными оболочками.  
=> явный учет спектра всех возможных возбужденных состояний ионов (с учетом его обрезания) затруднителен, либо практически нереален.
3. Сложность построения моделей для адекватного описания эффектов неидеальности в плотной плазме в широкой области температур и плотностей.

# Warm Dense Matter



## WDM regime:

- (i) near-solid density  
 $\Rightarrow$  strongly coupled plasma;

$$\Gamma = \frac{E_{pot}}{E_{kin}} \sim \frac{(Ze)^2 \sqrt[3]{\rho}}{kT}$$

- (ii) few-eV temperature  
 $\Rightarrow$  approaching  $T_{Fermi}$  ( $\gg T_{melt}$ );

$$E_{Fermi} \approx 7.86 \text{ eV} \left( \frac{n_e}{10^{23} \text{ cm}^{-3}} \right)^{\frac{2}{3}}$$

**( $\rho$ - $T$ ) диаграмма для алюминия [1]**

[1] K.Widmann, T.Ao, M.E.Foord, A.Ng, et al. *AC conductivity Measurements in Thin-Foil Experiments on USP*. High Energy Density Physics Summer School, Santa Cruz, California. August 4–16, 2002.

# Химическая модель плотной равновесной плазмы многозарядных ионов

## 1. Свободная энергия Гельмгольца [1-3]:

$$F(T, \rho, \mathbf{N}) = \sum_{q=0}^Z F_q^{(id)} + F_e^{(id)} + \Delta F(T, \rho, \mathbf{N}), \quad \mathbf{N} = \left\{ \left\{ N_q \right\}, N_e \right\}$$

$$F_q^{(id)} = -k_B T N_q \left[ \ln \left( \frac{\tilde{U}_q e^{-\beta \varepsilon_{0q}}}{\lambda^3 \rho N_q} \right) + 1 \right],$$

$$F_e^{(id)} = \frac{4}{\sqrt{\pi} \rho \lambda_e^3} \left( \mu_e I_{1/2}(\beta \mu_e) - \frac{2}{3} k_B T I_{3/2}(\beta \mu_e) \right),$$

[1] Я.Б.Зельдович, Ю.П.Райзер. *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*. М.: НАУКА (1966).

[2] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. *Теоретическая физика, т. V. Статистическая физика*. М: НАУКА (1964).

[3] В.К.Грязнов, И.Л.Иосилевский, В.Е.Фортов. *Термодинамические свойства ударно сжатой плазмы в представлении химической модели*. В сб. *Ударные волны и экстремальные состояния вещества*. 4  
Под ред. В.Е. Фортова и др. М: НАУКА, с. 342 (2000).

# Химическая модель плотной равновесной плазмы многочарядных ионов

2. Учет межчастичного взаимодействия:

$$\Delta F(T, \rho, N) = \Delta F_c^{(IS)} + \Delta F_{HS}^{(CS)}$$

**Кулоновское взаимодействие заряженных частиц**  
**Модель ионной сферы [4,5]:**

$$\Delta F_c^{(IS)}(T, \rho, N) = -\frac{9}{10} \sum_q N_q \frac{(qe)^2}{R_q}, \quad R_q = \left( \frac{3q}{4\pi\rho N_e} \right)^{1/3},$$

**Эффекты собственных объемов ионов**  
**Модель твердых сфер Карнахана-Старлинга [6]:**

$$\Delta F_{HS}^{(CS)}(T, \rho, N) = Nk_B T \cdot \frac{4\nu - 3\nu^2}{(1-\nu)^2}, \quad \nu = \frac{4\pi}{3V} \sum_q N_q r_q^3 = \sum_q N_q \left( \frac{r_q}{r_0^i} \right)^3.$$

[4] J.C.Stewart, K.D.Pyatt, Jr., *Astrophys. J.*, **144**, 1203–1211 (1966).

[5] R.M.More. *Atoms in Dense Plasmas*. Lecture at High-Energy-Density Physics Summer School, Santa Cruz, CA, August 4–16, 2002; in: *Atoms in Unusual Situations*, J.P.Briand ed. (Plenum, 1986).

[6] N.F.Carnahan, K.E.Starling, *J. Chem. Phys.*, **51**, 635 (1969).

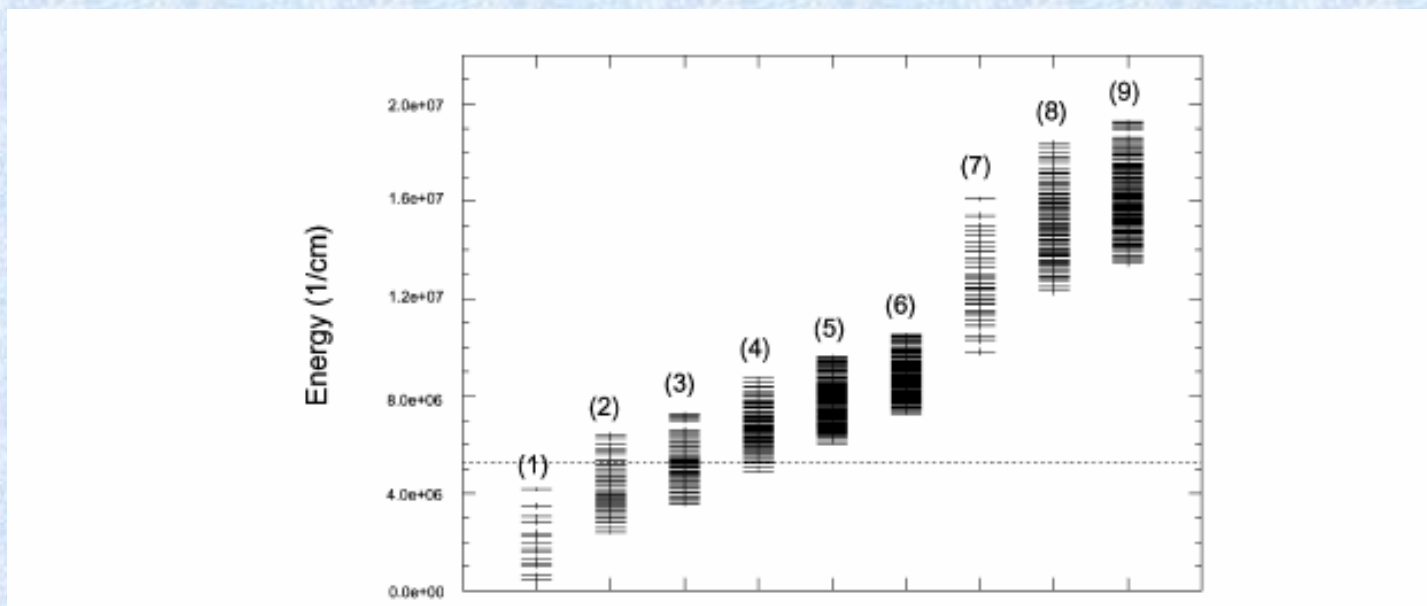
# Химическая модель плотной равновесной плазмы многозарядных ионов

## 3. Модифицированные уравнения Саха [1-3]:

$$\begin{cases}
 \min(F(T, \rho, N)) \\
 \left\{ \begin{array}{l}
 Al^{(0)} \rightleftharpoons Al^{(+1)} + e^-, \\
 Al^{(+1)} \rightleftharpoons Al^{(+2)} + e^-, \\
 \dots \\
 Al^{(+Z-1)} \rightleftharpoons Al^{(+Z)} + e^-.
 \end{array} \right. \rightarrow \left\{ \begin{array}{l}
 \frac{c_{q+1}}{c_q} = e^{-\beta\mu_e} \cdot \frac{\tilde{U}_{q+1}}{\tilde{U}_q} \cdot e^{-\beta(I_q - \Delta I_q^{(c)} - \Delta I_q^{(HS)})} \cdot e^{-\sum_{q'} N_{q'} \hat{L}(\ln \tilde{U}_{q'})}, \\
 \langle Z \rangle = \frac{4}{\sqrt{\pi} \rho N \lambda_e^3} I_{1/2}(\beta\mu_e), \\
 \sum_{q=0}^Z qc_q = \langle Z \rangle, \\
 \sum_{q=0}^Z c_q = 1.
 \end{array} \right.
 \end{cases}$$

$$\hat{L} \equiv \left( \frac{\partial}{\partial N_q} - \frac{\partial}{\partial N_{q+1}} - \frac{\partial}{\partial N_e} \right), \quad \Delta I_q(T, \rho, N) \equiv \hat{L} \cdot \Delta F(T, \rho, N)$$

# Химическая модель плотной равновесной плазмы многозарядных ионов



The superconfigurations selected in Ge XVIII

Label	Superconfiguration	No. of configurations
SC1	$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p3d)^5$	15
SC2	$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p3d)^4 (4s4p4d4f)^1$	48
SC3	$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p3d)^4 (5s5p5d5f5g)^1$	60
SC4	$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p3d)^3 (4s4p4d4f)^2$	90
SC5	$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p3d)^3 (4s4p4d4f)^1 (5s5p5d5f5g)^1$	180
SC6	$(1s)^2 (2s2p)^8 (3s3p3d)^3 (5s5p5d5f5g)^2$	135
SC7	$(1s)^2 (2s2p)^7 (3s3p3d)^6$	36
SC8	$(1s)^2 (2s2p)^7 (3s3p3d)^5 (4s4p4d4f)^1$	120
SC9	$(1s)^2 (2s2p)^7 (3s3p3d)^5 (5s5p5d5f5g)^1$	150

# Химическая модель плотной равновесной плазмы многозарядных ионов

## 4. Суперконфигурационный подход [7, 8]. Модифицированные статсуммы ионов:

$$\Xi_{Q_{\sigma_1}^{(j)} Q_{\sigma_2}^{(j)} Q_{\sigma_3}^{(j)} \dots}^{(j)} = (1s)^{Q_{\sigma_1}^{(j)}} (2s2p)^{Q_{\sigma_2}^{(j)}} (3s3p3d)^{Q_{\sigma_3}^{(j)}} \dots, \quad \sum_n Q_{\sigma_n}^{(j)} = Z - q, \quad Q_{\sigma_n}^{(j)} \leq 2n^2$$

$$\tilde{U}_q(T, \rho, N) = \sum_j \tilde{U}_{\Xi_q^{(j)}},$$

$$\tilde{U}_{\Xi_q^{(j)}} = \prod_{\sigma_n \in \Xi_q^{(j)}} \tilde{U}_{\sigma_n q} = \sum_{\sum_s q_s = Q_{\sigma_n}^{(j)}} \prod_{s \in \sigma_n} \binom{g_s}{q_s} \cdot \tilde{X}_s^{q_s}, \quad \tilde{X}_s = w_s^{(MF)}(T, \rho, N) \cdot e^{-\beta \varepsilon_{s_q}},$$

$\varepsilon_{s_q}$  – одноэлектронные энергии оболочек (расчет HFR-методом по программе CATS [9]);

$w_s^{(MF)}(T, \rho, N)$  – вероятности заселения одноэлектронных состояний ионов при учете возмущения плазменным микрополем [10].

[7] A.Bar-Shalom, et al., Phys. Rev. A., **40**, 3183–3193 (1989).

[8] J.Oreg, A.Bar-Shalom, M.Klapisch, Phys. Rev. E, **55**, 5, p. 5874 (1997).

[9] R.D.Cowan. *The theory of atomic structure and spectra*. UC. Press, Berkeley, Los Angeles, London (1981).

[10] A.Nayfonov, W.Dappen, D.Hummer, D.Mihalas, Ap. J., **526**, 451 (1999).



# Химическая модель плотной равновесной плазмы многозарядных ионов

## 5. Уравнения состояния плазмы [1-3]:

$$P(T, \rho, N) = P_i^{(id)} + P_e^{(id)} + \Delta P_{\text{int}} + \Delta P_c + \Delta P_{HS},$$

$$E(T, \rho, N) = E_i^{(id)} + E_e^{(id)} + E_{\text{ioniz}} + \Delta E_{\text{int}} + \Delta E_c + \Delta E_{HS}.$$

$$P_i^{(id)} = \rho N k_B T, \quad E_i^{(id)} = \frac{3}{2} N k_B T,$$

$$P_e^{(id)} = k_B T \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{I_{3/2}(\beta\mu_e)}{\lambda_e^3}, \quad E_e^{(id)} = k_B T \frac{4}{\sqrt{\pi}\rho} \frac{I_{3/2}(\beta\mu_e)}{\lambda_e^3},$$

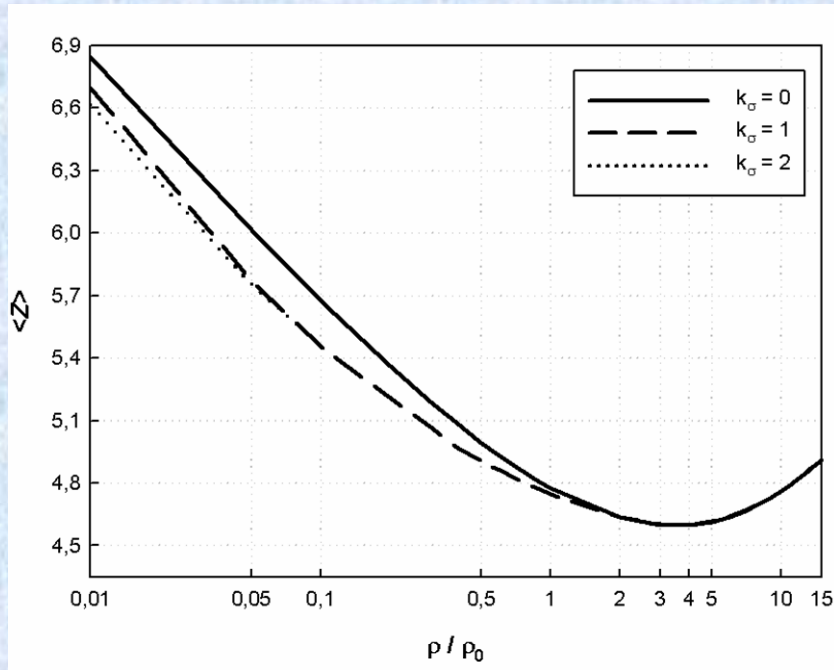
$$E_{\text{ioniz}} = \sum_q N_q \varepsilon_{0q} = \sum_q N_q (1 - \delta_{q,0}) \sum_{k=0, q>1}^{q-1} I_k,$$

$$\Delta P_{\text{int}} = k_B T \sum_q N_q \frac{\partial \ln \tilde{U}_q}{\partial V}, \quad \Delta E_{\text{int}} = k_B T^2 \cdot \sum_q N_q \frac{\partial \ln \tilde{U}_q}{\partial T}$$

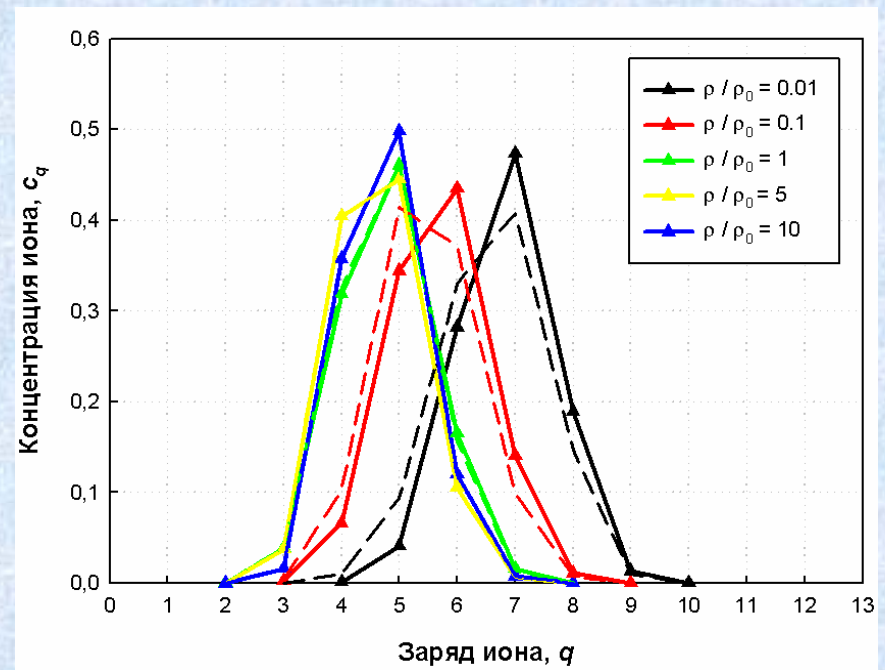
$$\Delta P_c = -\frac{3}{10} \sum_q \rho N_q \frac{(qe)^2}{R_q}, \quad \Delta E_c = -\frac{9}{10} \sum_q N_q \frac{(qe)^2}{R_q},$$

$$\Delta P_{HS} = -N k_B T \cdot \left( \frac{4-2\nu}{(1-\nu)^3} \right) \cdot \frac{\partial \nu}{\partial V}, \quad \Delta E_{HS} = -N k_B T^2 \cdot \left( \frac{4-2\nu}{(1-\nu)^3} \right) \cdot \frac{\partial \nu}{\partial T}.$$

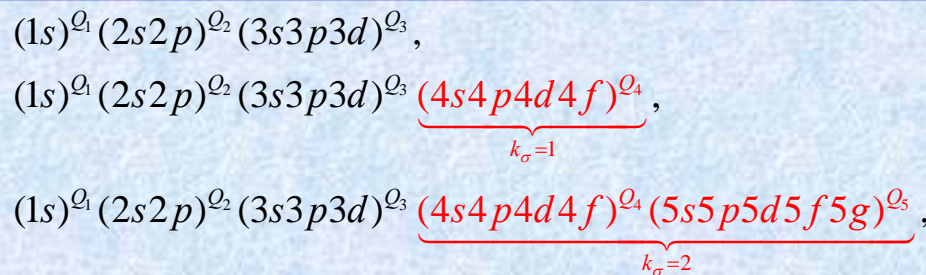
# Результаты расчетов



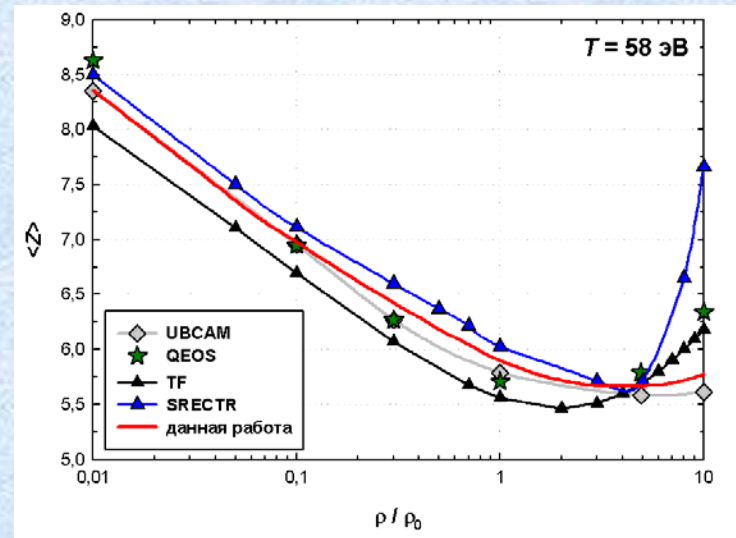
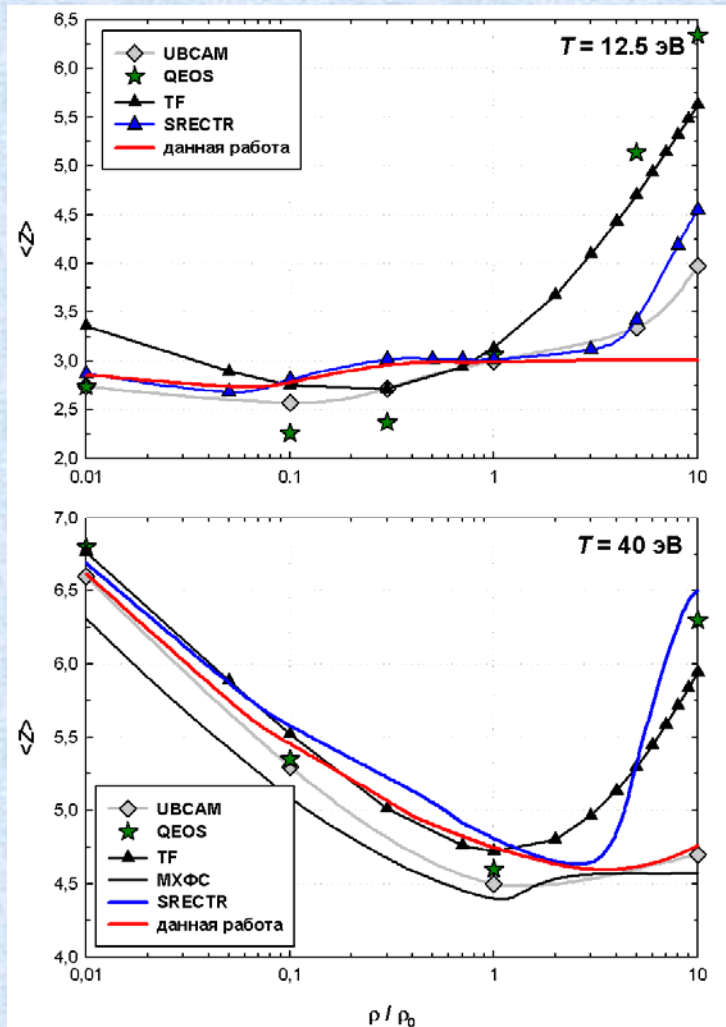
Влияние числа учтенных супероболочек на зависимость степени ионизации  $\langle Z \rangle$  плазмы алюминия при  $T=40$  эВ от относительной плотности  $\rho/\rho_0$



Состав плазмы алюминия при температуре  $T = 40$  эВ в зависимости от относительной плотности  $\rho/\rho_0$ . Сплошные линии – расчет при  $k_\sigma = 0$ ; пунктир – расчет при  $k_\sigma = 2$



# Результаты расчетов



Степень ионизации плазмы  $A/I$  в зависимости от плотности при  $T = 12.5, 40, 58$  эВ

**UBCAM, QEOS** – данные работы [11];

**TF** – интерполяция степени ионизации по модели Томаса-Ферми [12];

**SPECTR** – результаты расчета по пакету SPECTR (РФЯЦ-ВНИИТФ) [13];

**МХФС** – данные работы [14].

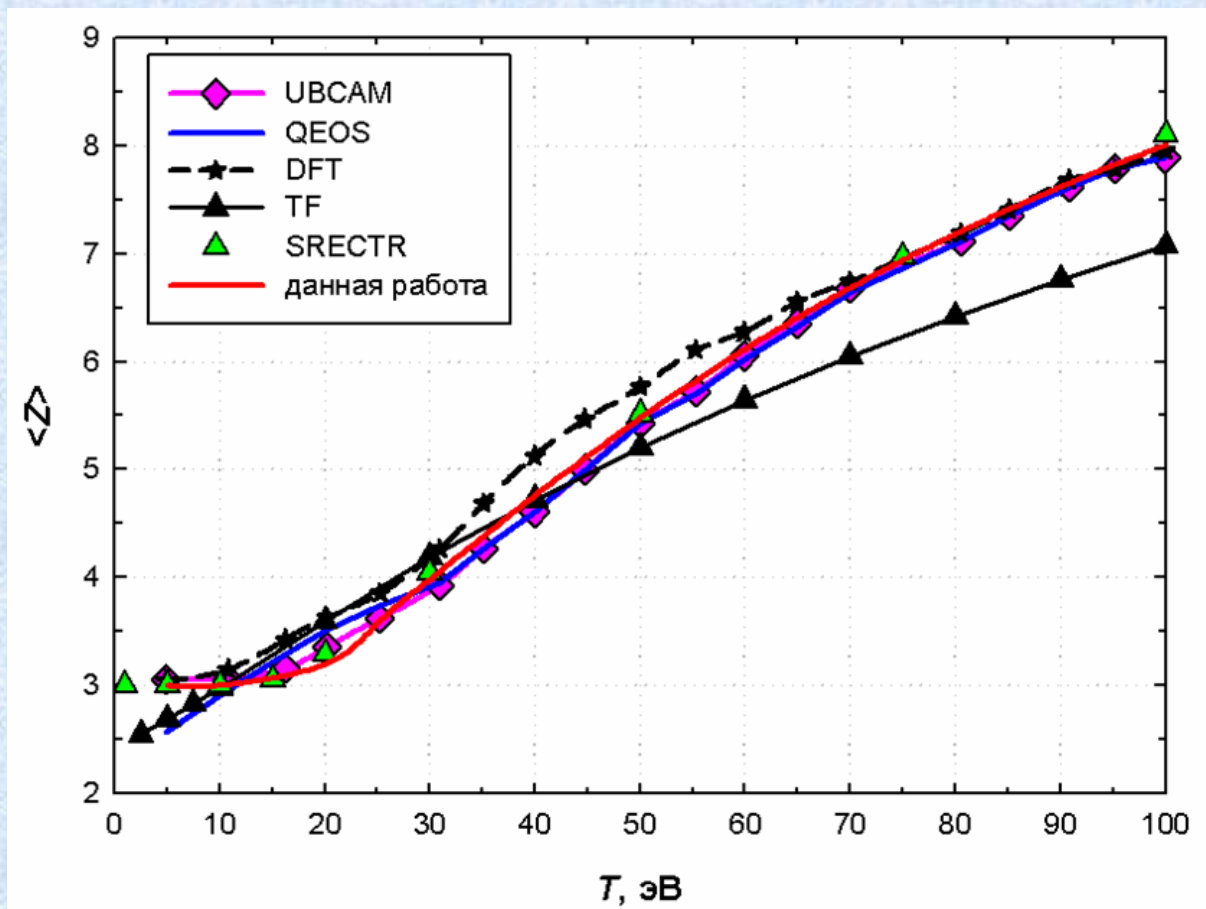
[11] G.Chiu, A.Ng. Pressure ionization in dense plasmas, Phys. Rev. E., 59, 1024 (1999).

[12] R.M.More. Advances in atomic and molecular physics, 21, p. 305 (1985).

[13] P.A.Loboda, D.S.Netsvetayev, V.V.Popova, L.B.Samolovskikh, J. Phys. A: Math. Gen. 39, 4781–4786 (2006).

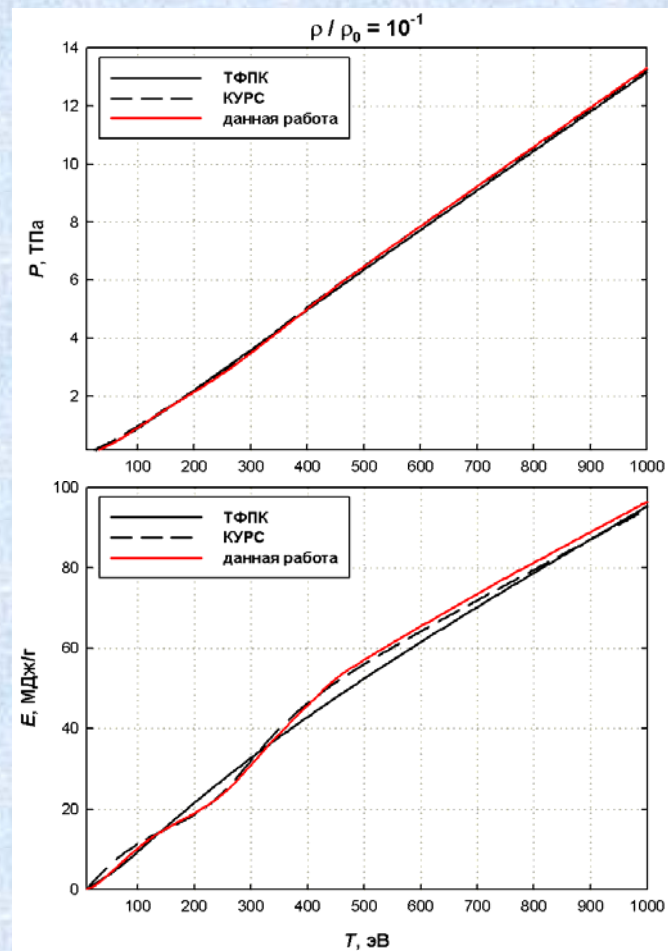
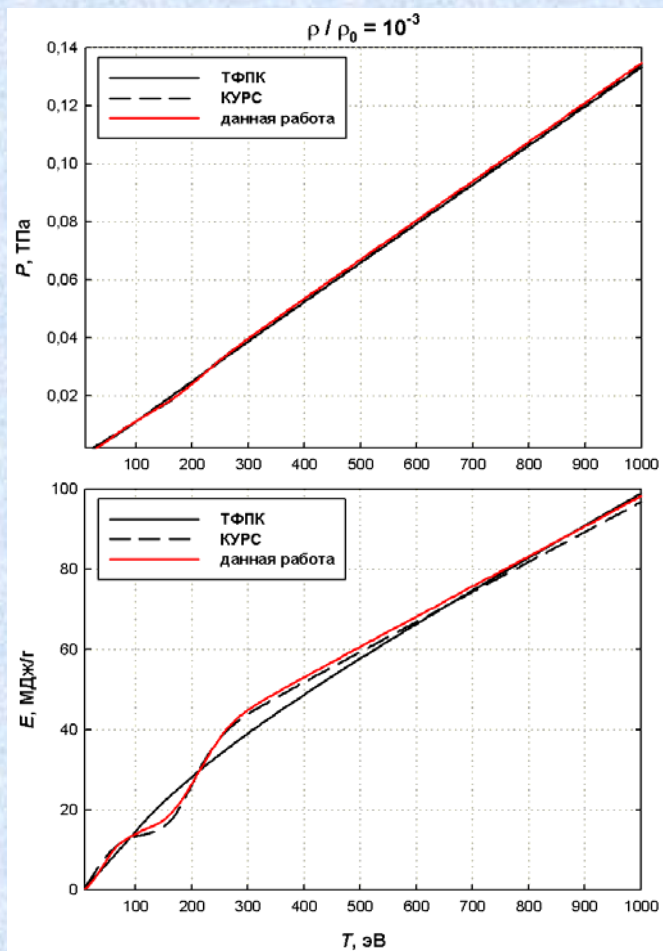
[14] А.Ф.Никифоров, В.Г.Новиков, С.К.Труханов, В.Б.Уваров, ВАИТ, сер. Методики и программы ..., 3, стр. 62–74 (1990).

## Результаты расчетов



Степень ионизации плазмы алюминия в зависимости от температуры при нормальной плотности. UBCAM (радиационно-столкновительная модель с использованием эффективного экранированного потенциала, учитывающего квазисвязанные состояния), QEOS, DFT (метод функционала плотности) – данные работы [11]; TF – интерполяция степени ионизации по модели Томаса-Ферми [12]; SPECTR – результаты расчета по пакету расчета непрозрачностей SPECTR (РФЯЦ-ВНИИТФ) [13]

# Результаты расчетов



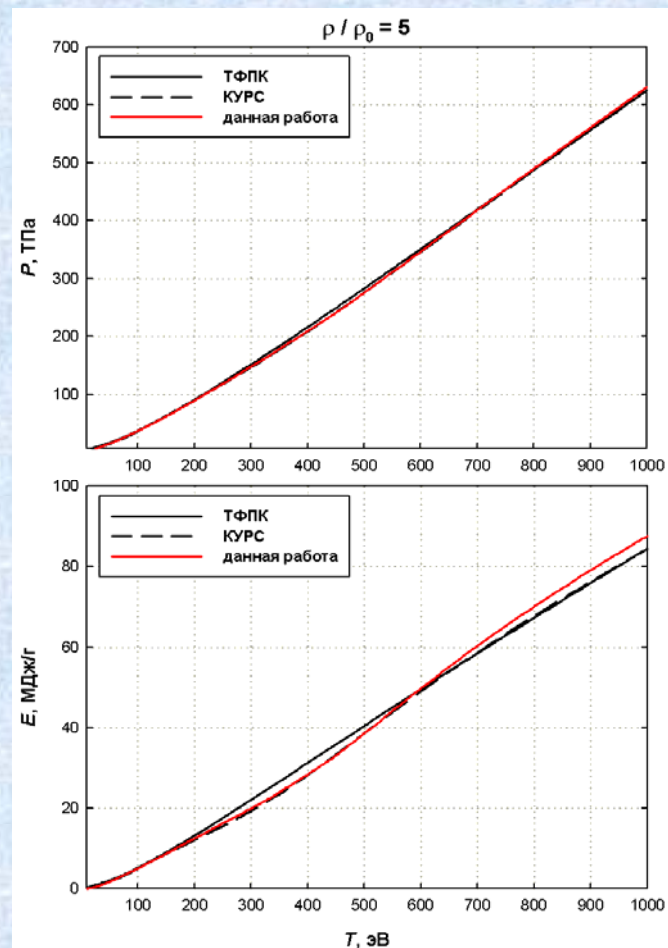
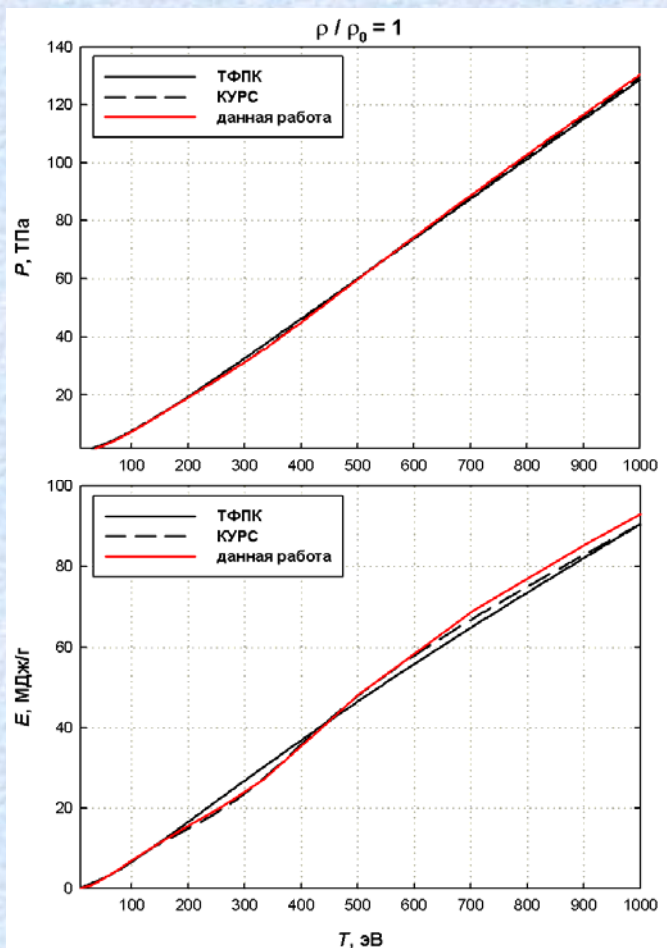
Давление и удельная внутренняя энергия плазмы алюминия вдоль изохор  $\rho/\rho_0 = 10^{-3}; 10^{-1}$

[15] ТФПК: Н.Н.Калиткин, Л.В.Кузьмина. *Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии*. Препринт ИПМ АН СССР, № 35 (1975).

В.П.Копышев. *О термодинамике ядер одноатомного вещества*. ЧММСС, 8,54–7 (1977).

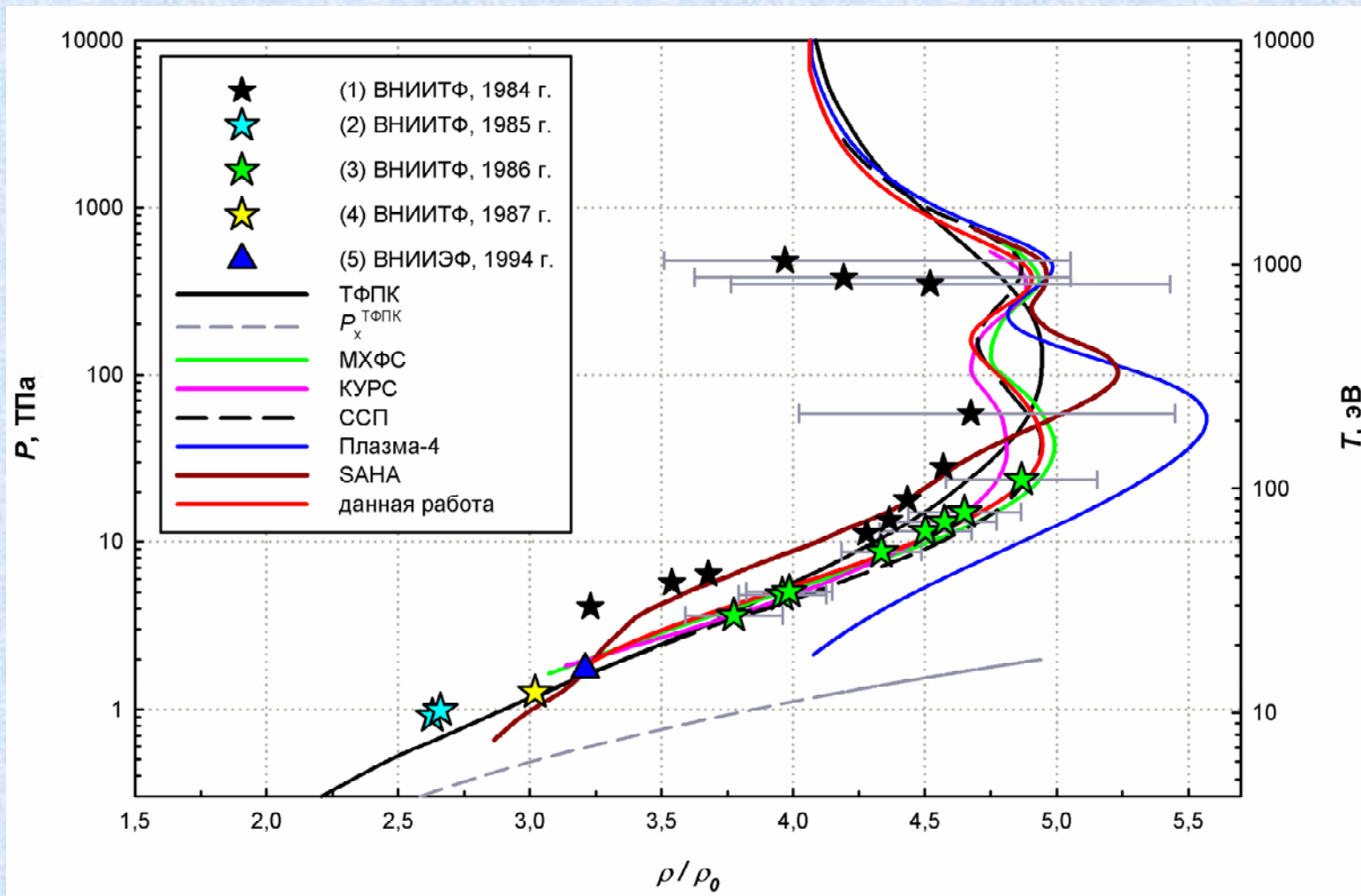
[16] КУРС (РФЯЦ-ВНИИТФ): А.В.Андрияш, В.А.Симоненко. *Оценка влияния оболочечных эффектов на термодинамические свойства веществ*. ВАНТ, сер. Методики и программы ..., 2, 52–56 (1984).

# Результаты расчетов



Давление и удельная внутренняя энергия плазмы алюминия вдоль изохор  $\rho/\rho_0 = 1; 5$

# Результаты расчетов



## Ударная адиабата сплошного алюминия

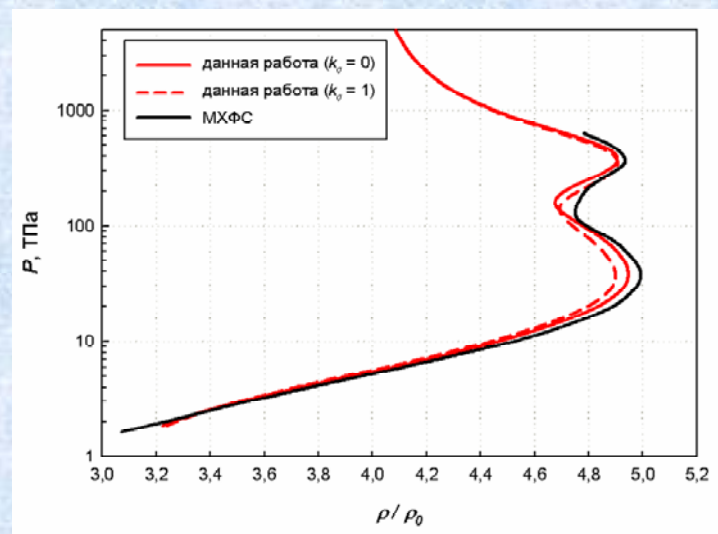
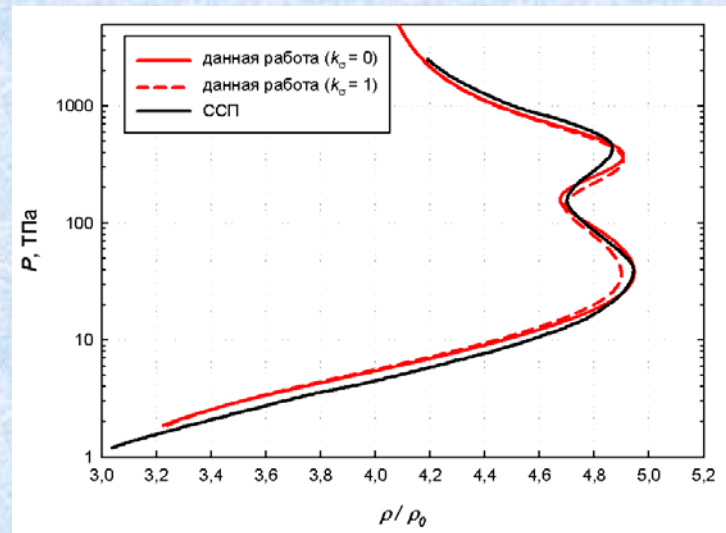
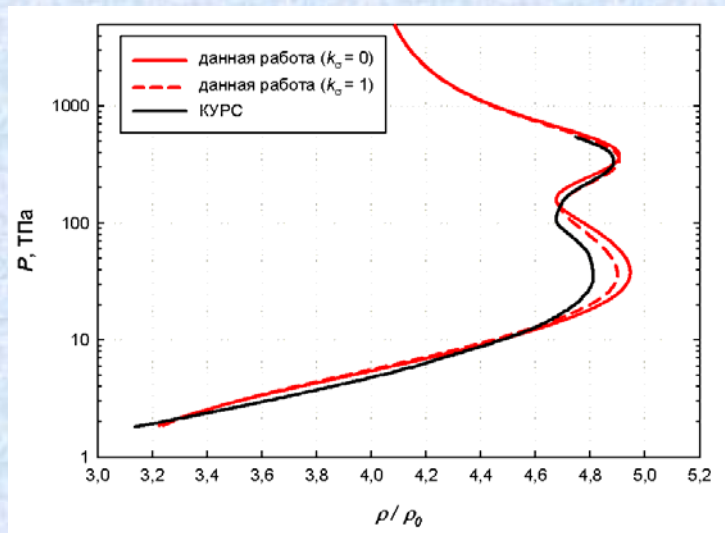
Экспериментальные данные: (1) – [17]; (2) – [18]; (3) – [19]; (4) – [20]; (5) – данные [21].

Теоретические модели: ТФПК [15], МХФС [14], КУРС (РФЯЦ-ВНИИТФ) [22],  
ССП (РФЯЦ-ВНИИТФ) [23], Плазма-4 [24], САНА [3], настоящая работа.

- [17] А.С.Владимиров, Н.П.Волошин, В.Н.Ногин, А.В.Петровцев, В.А.Симоненко. *Ударная сжимаемость Al при давлениях  $P > 1$  Гбар*. Письма в ЖЭТФ, 39, стр. 69 (1984).
- [18] В.А.Симоненко, Н.П.Волошин, А.С.Владимиров, А.П.Нагибин, В.Н.Ногин и др. *Абсолютные измерения ударной сжимаемости Al при давлениях  $P > 1$  ТПа*. ЖЭТФ, 88, вып. 4, стр. 1452–1459 (1985).
- [19] Е.Н.Аврорин, Б.К.Водолага, Н.П.Волошин, В.Ф.Куропатенко. *Экспериментальное подтверждение оболочечных эффектов на ударных адиабатах Al, Pb*. Письма в ЖЭТФ, 43, стр. 241 (1986).
- [20] Е.Н.Аврорин, Б.К.Водолага, Н.П.Волошин, Г.В.Коваленко, В.Ф.Куропатенко, В.А.Симоненко, Б.Т.Черноволюк. *Экспериментальное изучение оболочечных эффектов на ударных адиабатах конденсированных веществ*. ЖЭТФ, 93, вып. 2, стр. 613–626 (1987).
- [21] М.А.Подурец, В.М.Ктиторов, Р.Ф.Трунин, Л.В.Попов, А.Я.Матвеев, Б.В.Печёнкин, А.Г.Севастьянов. *Ударно-волновое сжатие Al при давлениях в 1.7 ТПа*. ТВТ, 32, № 6, стр. 952–955 (1994).
- [22] А.В.Андряш, В.А.Симоненко. *Статистическая оболочечная модель высокотемпературной плотной плазмы*. Физика плазмы, 14, № 10, стр. 1201–1208 (1988).
- [23] Н.М.Барышева, Г.В.Синько. *Результаты расчета уравнений состояния Al, Fe, Pb методом самосогласованного поля*. Численные методы мех. спл. среды, 13, № 5, стр. 3–12 (1982).
- [24] Н.Н.Калиткин, И.В.Ритус, А.М.Миронов. *Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов*. Препринт ИПМ АН СССР, № 46 (1983).



# Результаты расчетов



Ударная адиабата сплошного алюминия. Сравнение результатов настоящей работы с теоретическими моделями КУРС (РФЯЦ-ВНИИТФ), ССП (РФЯЦ-ВНИИТФ), МХФС

## Заключение

Представлены результаты моделирования термодинамических характеристик плотной равновесной плазмы многозарядных ионов алюминия на основе химической модели.

Построенное согласованное описание термодинамических характеристик плотной равновесной плазмы многозарядных ионов учитывает:

- вклад всех связанных состояний ионов (на основе суперконфигурационного подхода), которые могут реализоваться в рамках физически обоснованного критерия обрезания статсумм;
- эффекты кулоновской неидеальности (в настоящее время может использоваться модель ионной сферы или модель Дебая-Хюккеля в БКА) и вырождения подсистемы свободных электронов;
- эффекты собственных объемов ионов по модели твердых сфер, параметры которой – эффективные радиусы ионов, согласованы с учтенными в статсуммах ионов вкладами возбужденных конфигураций.

Представленные результаты расчетов по химической модели плотной плазмы согласуются с рядом теоретических моделей плотного горячего вещества.

## Параметры химической модели

### 1. Вещество

$Z, A_Z, \rho_0, \{I_q\}, \{\epsilon_{nl,q}\}$

Диапазон  $T, \rho$

### 2. Модель неидеальности

**Кулоновское взаимодействие заряженных частиц:**

IS – модель ионной сферы

DN-BKA – модель Дебая-Хюккеля в БКА

**Адекватная модель кулоновской неидеальности**

**Эффекты собственных объемов ионов:**

CS-HS – однокомпонентная модель Карнахана-Старлинга для твердых сфер (с обобщением на смесь)

Y-SS – модель Янга для мягких (нейтральных) сфер?

### 3. Учет вырождения электронной подсистемы плазмы

Статистика Ферми-Дирака

### 4. Модель STA для расчета статсумм ионов $\{U_q\}$

**Способ разбиения на супероболочки:**

а) по главному квантовому числу  $(1s)^{Q1}(2s2p)^{Q2}(3s3p3d)^{Q3}..$

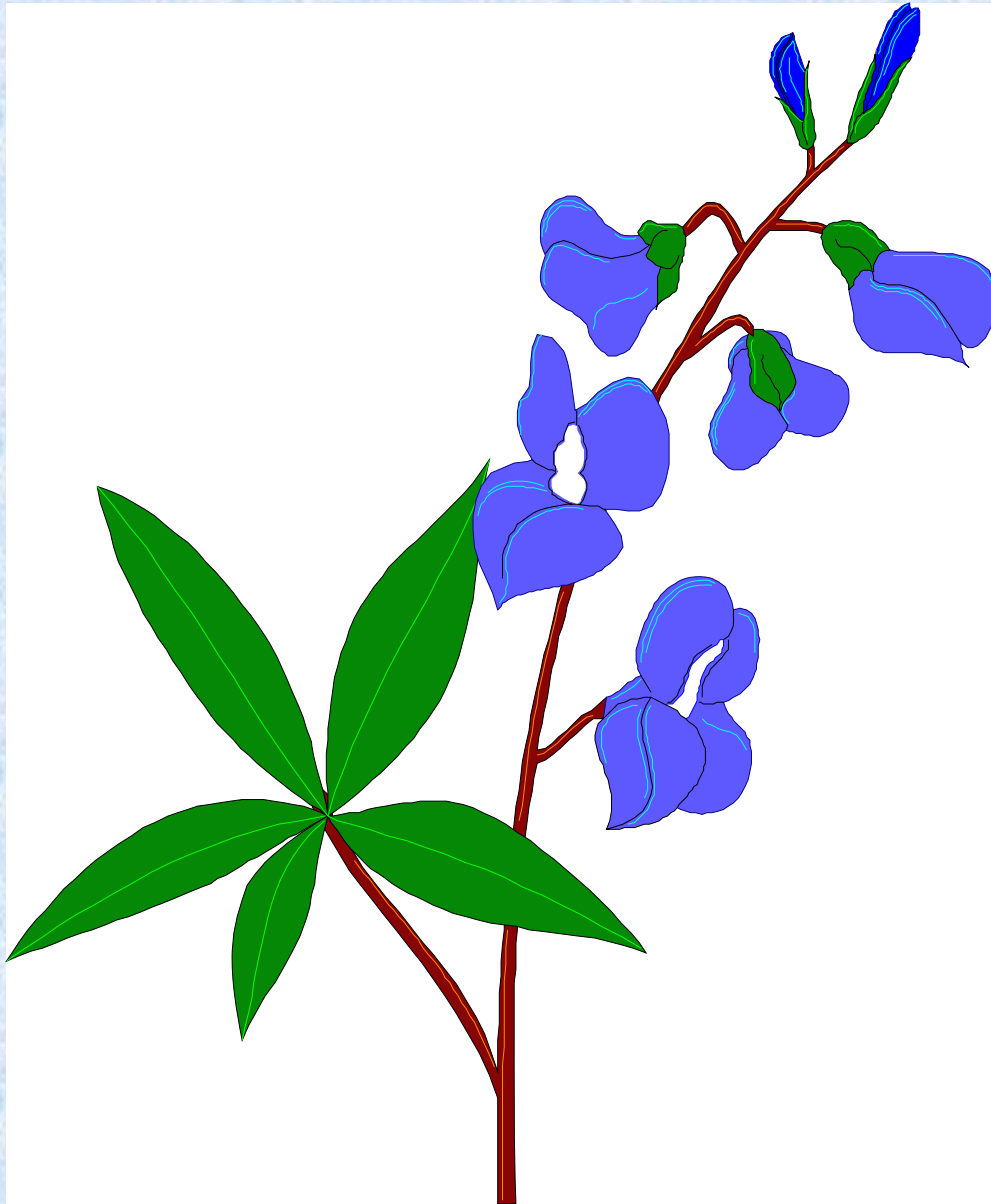
б) гибкое разбиение, индивидуальное для каждого иона

### 5. Модель обрезания плазменным микрополем

Аппроксимация микрополевого распределения Хупера

**Модифицированная модель Хупера с учетом вырождения свободных электронов**

# Дальнейшее развитие ХМП на основе суперконфигурационного подхода



**Спасибо  
за  
внимание!**