

Существует ли сильно неидеальная газовая плазма?

Н.Н. Калиткин, И.А. Козлитин
Институт математического моделирования РАН

Плазменное микрополе

Нашу модель микрополя, модель квазинезависимых частиц QUIP, мы докладывали два года назад. Напомню, что она построена целиком из первых принципов и дает явное выражение для плотности распределения модуля микрополя $p(E)$. Это распределение максвелловского типа, а его параметры выражаются через параметр неидеальности Γ , межчастичное расстояние R и эффективный заряд z . В случае плазмы сложного состава заряд берется по Хольцмарку.

$$p(E) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} E_0^{-3} \exp(-E^2 / E_0^2) E^2, \quad (1)$$
$$E_0 = \frac{z}{R^2} \sqrt{\frac{18}{5+9\Gamma}}, \quad \Gamma = \frac{z_h^2}{RT}.$$

Известные ранее модели (Хольцмарка, группы Иглесиаса, Голосного) для разреженной плазмы давали распределение $p(E)$ со слабо затухающим «хвостом». Поэтому в них плотность энергии микрополя оказывалась бесконечной, что нефизично. Модель QUIP свободна от этого недостатка. Кроме того, модель QUIP правильно предсказывает числа оптических линий, наблюдаемых в плотной плазме, а предшествующие модели ошибаются в несколько раз. Поэтому модель QUIP можно считать надежно апробированной.

Термодинамика плазмы

Как применить микрополе к описанию термодинамики? Мы исходили из той идеи, что раз микрополе создано заряженными частицами, то его надо рассматривать как самосогласованное поле, описывающее взаимодействия этих частиц. Тогда в качестве поправки на неидеальность к энергии надо взять объемную плотность энергии микрополя, умноженную на объем атомной ячейки. При этом по термодинамическим соотношениям можно восстановить поправки на неидеальность ко всем остальным термодинамическим функциям и найти выражения для сдвига потенциала. Получаются несложные явные формулы. В эти формулы входят дополнительные члены (поправки δP , δE , δS , $\delta \varphi_k$), получающиеся при дифференцировании статистических сумм по температуре и объему. Это необходимо для полной термодинамической согласованности модели.

$$\Delta E = -\frac{z_h^2}{R} \left(\frac{10}{9} + 2\Gamma \right)^{-1}, \quad \Delta F = -\frac{T}{2} \ln \left(1 + \frac{9}{5}\Gamma \right), \quad \Delta P = -\frac{3}{10} \frac{\Gamma T}{V} \left(1 + \frac{9}{5}\Gamma \right)^{-1},$$
$$\Delta S = \Delta E - \Delta F / T, \quad \Delta \varphi_k = -\frac{6}{5R} z_h^{1/2} \left(k^{3/2} - (k-1)^{3/2} + 1 \right) \frac{5}{5+9\Gamma}, \quad (2)$$
$$\delta P = \frac{20 + 27\Gamma}{30 + 54\Gamma} \frac{C}{V}, \quad \delta E = -\frac{3\Gamma}{10 + 18\Gamma} C, \quad \delta S = \frac{1}{T} \delta E,$$
$$\delta \varphi_k = \frac{10}{15 + 27\Gamma} \frac{k^{3/2} - (k-1)^{3/2} + 1}{z_h^{3/2}} C, \quad C = T \sum_m x_m \frac{E_m}{E_0} \frac{\omega'}{\omega}.$$

В самих статистических суммах учитывается не только больцмановский множитель, но и формфактор ω , учитывающий микрополевоe уменьшение заселенности уровней.

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} g_n^*, \quad g_n^* = g_n \exp(-\varepsilon_n / T) \omega_n, \quad (3)$$

$$\omega_n = \int_0^{E_n} p(E) dE, \quad E_n = \frac{(\varphi - \varepsilon_n)^2}{4z}.$$

где φ - потенциал ионизации, z - заряд ионного остова ($z = 1$ для нейтрального атома), ε_n - энергия n -ного уровня, отсчитанная от основного состояния.

Учет микрополевого формфактора ω принципиально важен, так как при этом статистические суммы становятся непрерывными и гладкими функциями температуры и плотности. Без формфактора они были бы разрывными, что приводило бы к нефизическим скачкам при повышении плотности.

Обобщенные уравнения Саха

Остается решить уравнения Саха с этими поправками. Мы используем обобщенные уравнения Саха с учетом вырождения электронов и со статистическими суммами, обрезанными плазменным микрополем. Был разработан быстрый алгоритм, позволяющий рассчитывать подробные таблицы на персональном компьютере.

$$\mu + T \ln \left(\frac{G_{i,k-1} x_{ik}}{G_{ik} x_{i,k-1}} \right) + \varphi_{ik} + \Delta \varphi_{ik} + \delta \varphi_{ik} = 0, \quad 1 \leq k \leq z_i, \quad 1 \leq i \leq J,$$

$$\Delta \varphi_{ik} = \left(\frac{\partial}{\partial x_{ik}} - \frac{\partial}{\partial x_{i,k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e} \right) \Delta F, \quad (4)$$

$$\delta \varphi_{ik} = -T \sum_{j=1}^J \sum_{q=1}^{z_j} x_{jq} \left(\frac{\partial}{\partial x_{ik}} - \frac{\partial}{\partial x_{i,k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e} \right) \ln G_{jq}.$$

Сравнение с SESAM

Приведу результат сравнения наших расчетов с SESAM (рис. 1). SESAM – библиотека свойств веществ, включающая широкодиапазонные уравнения состояния. Там используются расчеты по модели Томаса-Ферми-Дирака, есть плавление, расчеты двухфазных областей и др., но при температурах выше примерно 0.2 потенциала первой ионизации модель ионизационного равновесия и UPC SESAM близки.

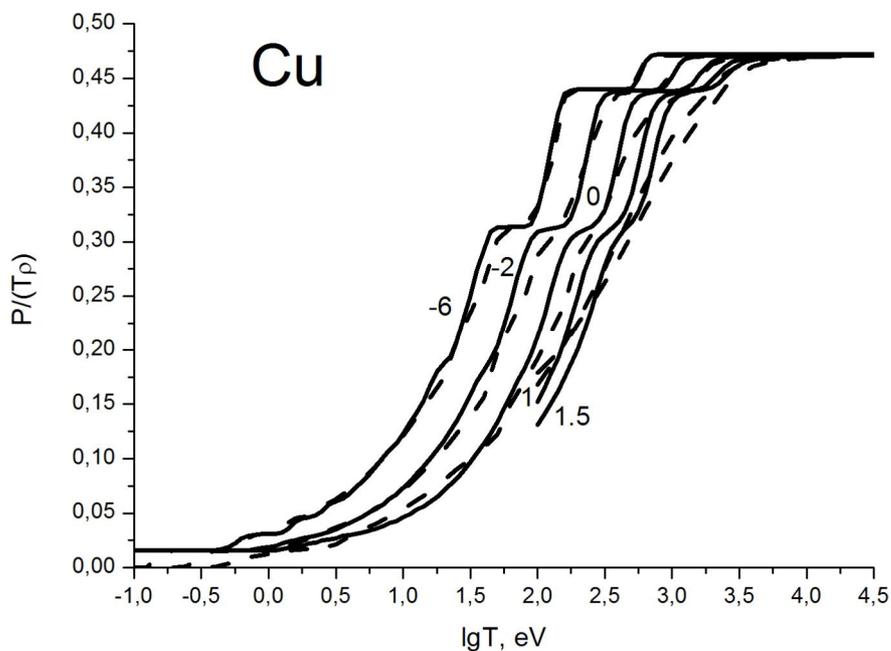
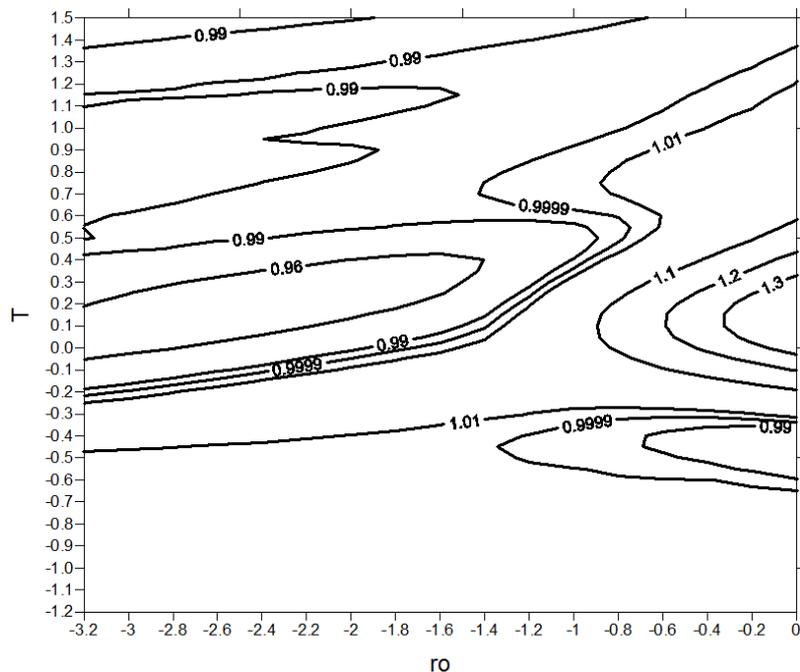


Рис. 1 Изохоры приведенного давления для плазмы Cu. Рядом с кривыми указан десятичный логарифм плотности плазмы в г/см^3 . Сплошные линии – модель неидеальной плазмы QUIP, пунктирные – SESAM.

Мера неидеальности плазмы

Вопросы неидеальности мы исследовали подробнее. Параметр Γ формален, и при больших плотностях плазмы может принимать очень большие значения. Указывает ли это на большую неидеальность плазмы?

За физический, а не формальный критерий неидеальности целесообразно принять отличие результатов от расчетов по модели идеальной плазмы. Проведем два расчета: по модели неидеальной плазмы и по модели идеальной плазмы. Отношение степеней ионизации и термодинамических функций, рассчитанных по двум этим моделям, более адекватная мера неидеальности. На рис. 2 изображены изолинии отношения давления, рассчитанного по нашей модели, к давлению идеальной плазмы.



QUIP P / Ideal P, Cs

Рис. 2 Изолинии отношения давления, рассчитанного по модели ионизационного равновесия к давлению идеальной плазмы для плазмы Cs. По оси абсцисс отложен десятичный логарифм плотности в $\text{г}/\text{см}^3$, по оси ординат - десятичный логарифм температуры в эВ. На кривых указана величина отношения.

Степень неидеальности плазмы

Отношение давлений мало отклоняется от 1 всюду даже при плотности в $1 \text{ г}/\text{см}^3$. Таким образом, получается, что сколько-нибудь сильных термодинамических эффектов неидеальности, не говоря уже о плазменных фазовых переходах, просто нет. То есть неидеальной газовой плазмы в нашей модели нет (аналогичные результаты получаются в известной модели Ликальтера).

К сожалению, надежных термодинамических экспериментов с предположительно сильно неидеальной плазмой нет. Однако ни в одном из экспериментов не было обнаружено чего-либо, напоминающего плазменный фазовый переход. Поэтому мы берем на себя смелость сделать вывод, что теория и эксперимент свидетельствуют об отсутствии плазменных фазовых переходов в газовой плазме.

Развитие модели

В настоящее время мы занимаемся дальнейшим развитием нашей модели. Сейчас в ее рамках мы начали аккуратно рассчитывать уширение спектральных линий водородоподобных ионов. Далее на очереди следующее: ионизационное равновесие при росте плотности и уменьшении температуры должно переходить в модель Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. Если качественно описать этот переход, то всю верхнюю часть диаграммы состояния можно описать только двумя моделями, в то время как в SESAM для этой области требуется с полдюжины моделей.

Литература

1. **Энциклопедия низкотемпературной плазмы** Т. VII-1 Математическое моделирование в низкотемпературной плазме Часть 2 : Серия Б справочные приложения, базы и банки данных / Ред. Ю.П. Попов - М.: ЯНУС-К, 2008, с. 466-473.
2. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. Модель квазинезависимых частиц для плазменного микрополя* // ДАН, 2008, том 418, вып. 5, с. 614–618.
3. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. Сравнение детального состава плазмы в различных моделях* // Математическое моделирование, 2008, т.20, №4, с.69-77.
4. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. Микрополевые поправки к термодинамике неидеальной плазмы* // Математическое моделирование, 2009, т.21, №7, с.55-66.
5. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. Существует ли неидеальная газовая плазма?* // Труды XI Харитоновских чтений, Саров, 2009, с. 189-194.