

# Существует ли сильно неидеальная газовая плазма?

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

## Плазменное микрополе

Нашу модель микрополя, модель квазинеzáвисимых 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  $\Gamma$ , 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  $\delta P$ ,  $\delta E$ ,  $\delta S$ ,  $\delta \varphi_k$ ), 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  $\omega$ , 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  $\varphi$  - потенциал ионизации,  $z$  - заряд ионного остова ( $z = 1$  для нейтрального атома),  $\varepsilon_n$  - энергия  $n$ -ного уровня, отсчитанная от основного состояния.

Учет микрополевого формфактора  $\omega$  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.

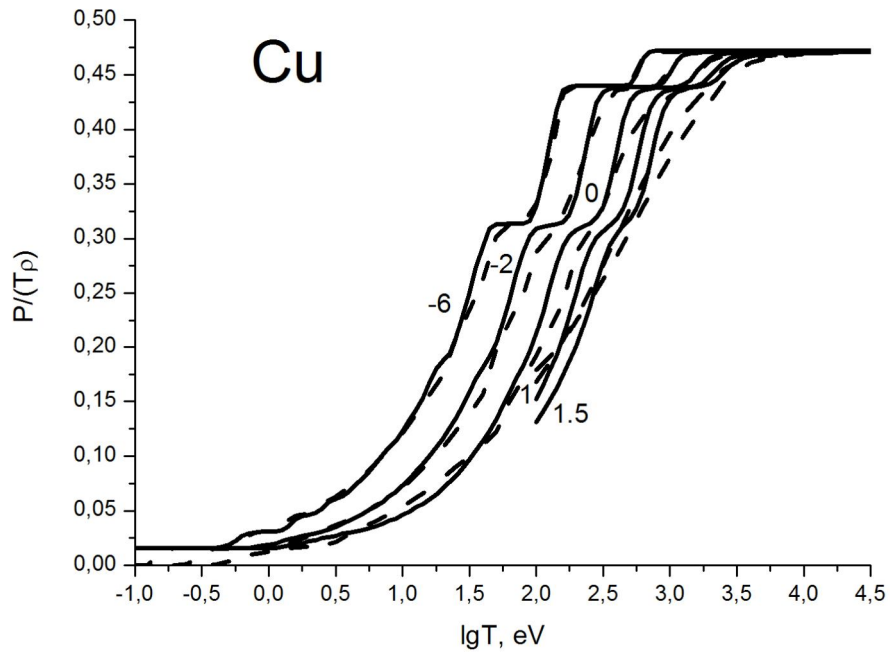
$$\mu + T \ln \left( \frac{G_{i,k-1} x_{ik}}{G_{ik} x_{i,k-1}} \right) + \varphi_{ik} + \Delta \varphi_{ik} + \delta \varphi_{ik} = 0, \quad 1 \leq k \leq z_i, \quad 1 \leq i \leq J,$$

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

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

## 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.

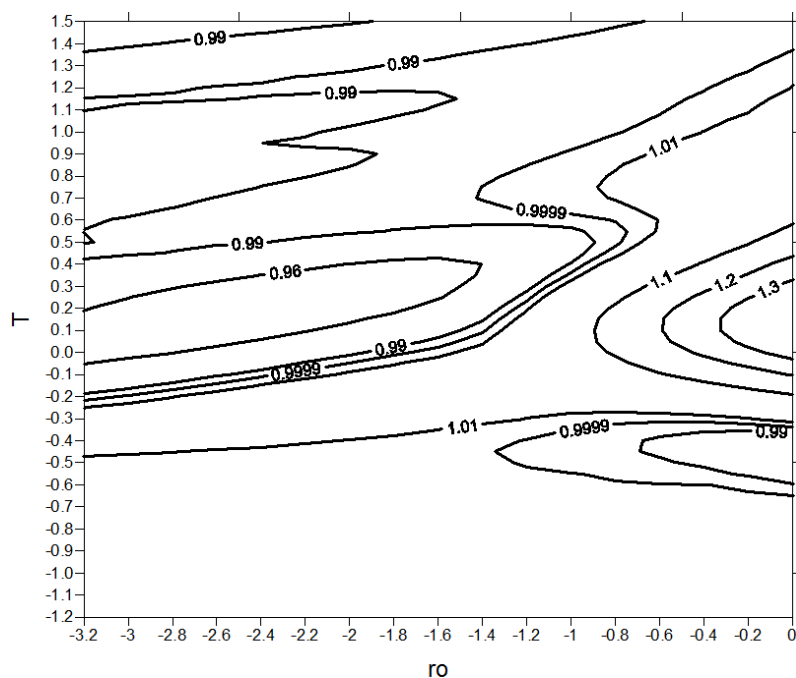


**Рис. 1** Изохоры приведенного давления для плазмы Cu. Рядом с кривыми указан десятичный логарифм плотности плазмы в  $\text{г/см}^3$ . Сплошные линии – модель неидеальной плазмы QUIP, пунктирные – SESAM.

## Мера неидеальности плазмы

Вопросы неидеальности мы исследовали подробнее. Параметр  $\Gamma$  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  $\text{г/см}^3$ , 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  $1 \text{ г/см}^3$ . 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.