

# Уравнение состояния сильно нагретой углеродно-кислородной плазмы

А.Ю.Потехин

*Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН*

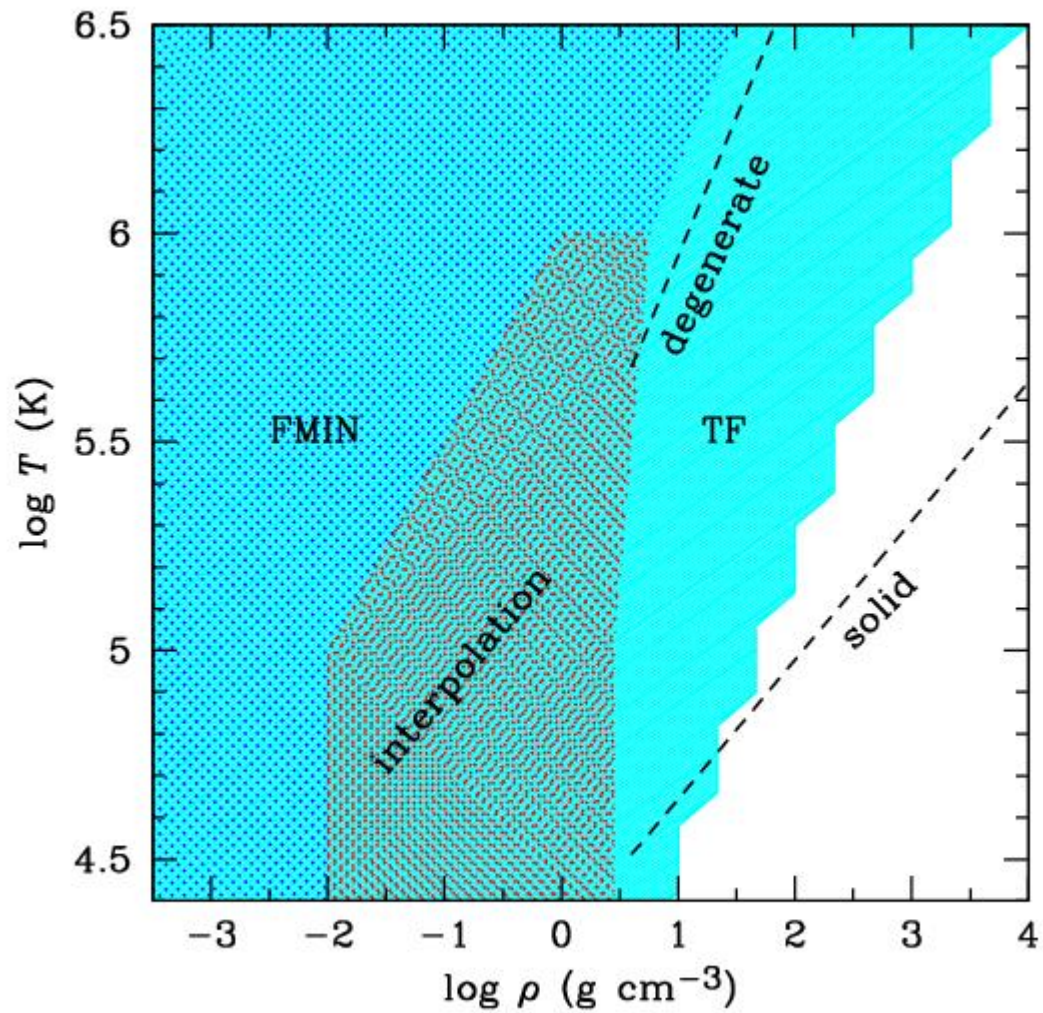
G. Massacrier, G. Chabrier

*Centre de Recherche Astrophysique de Lyon,*

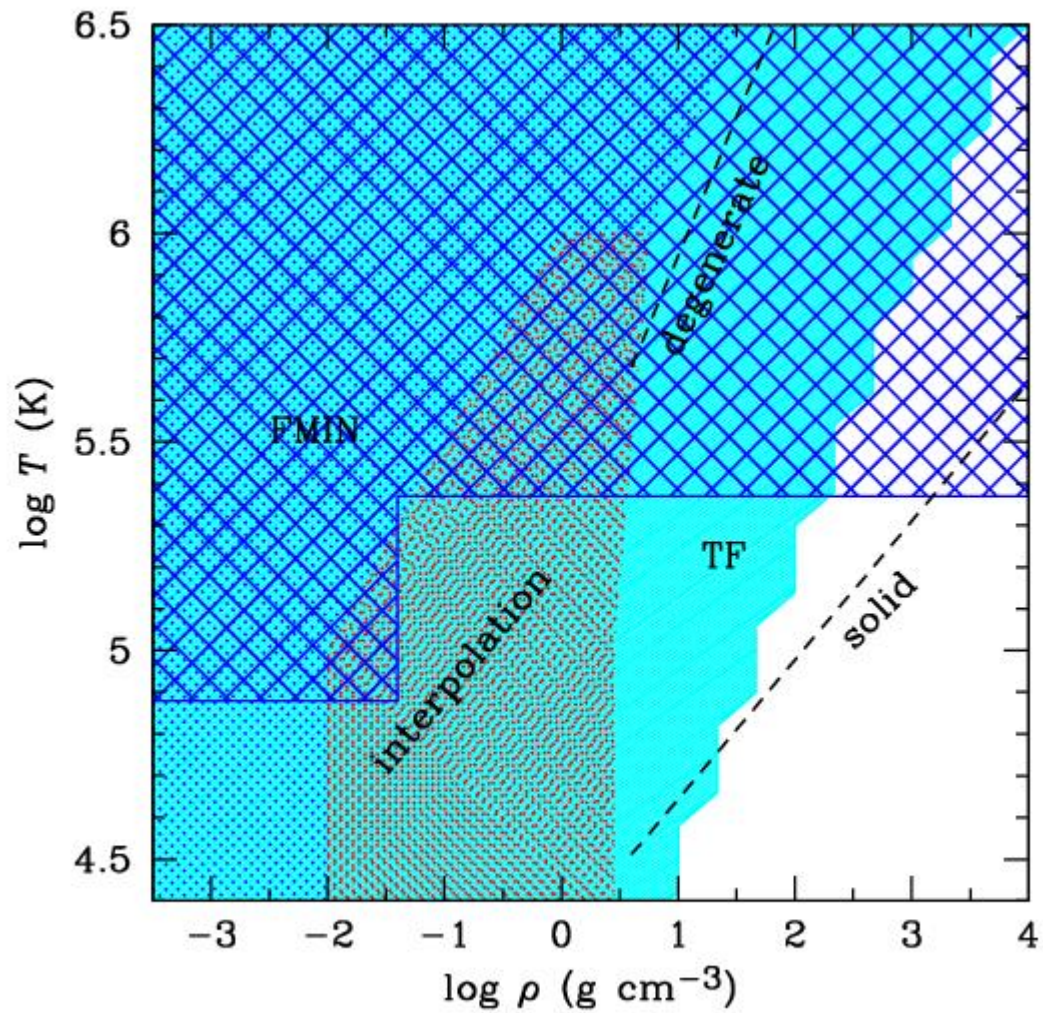
*Ecole Normale Supérieure de Lyon*

1. Введение
2. Модель свободной энергии
3. Ионизационное равновесие
4. Термодинамические функции
5. Заключение

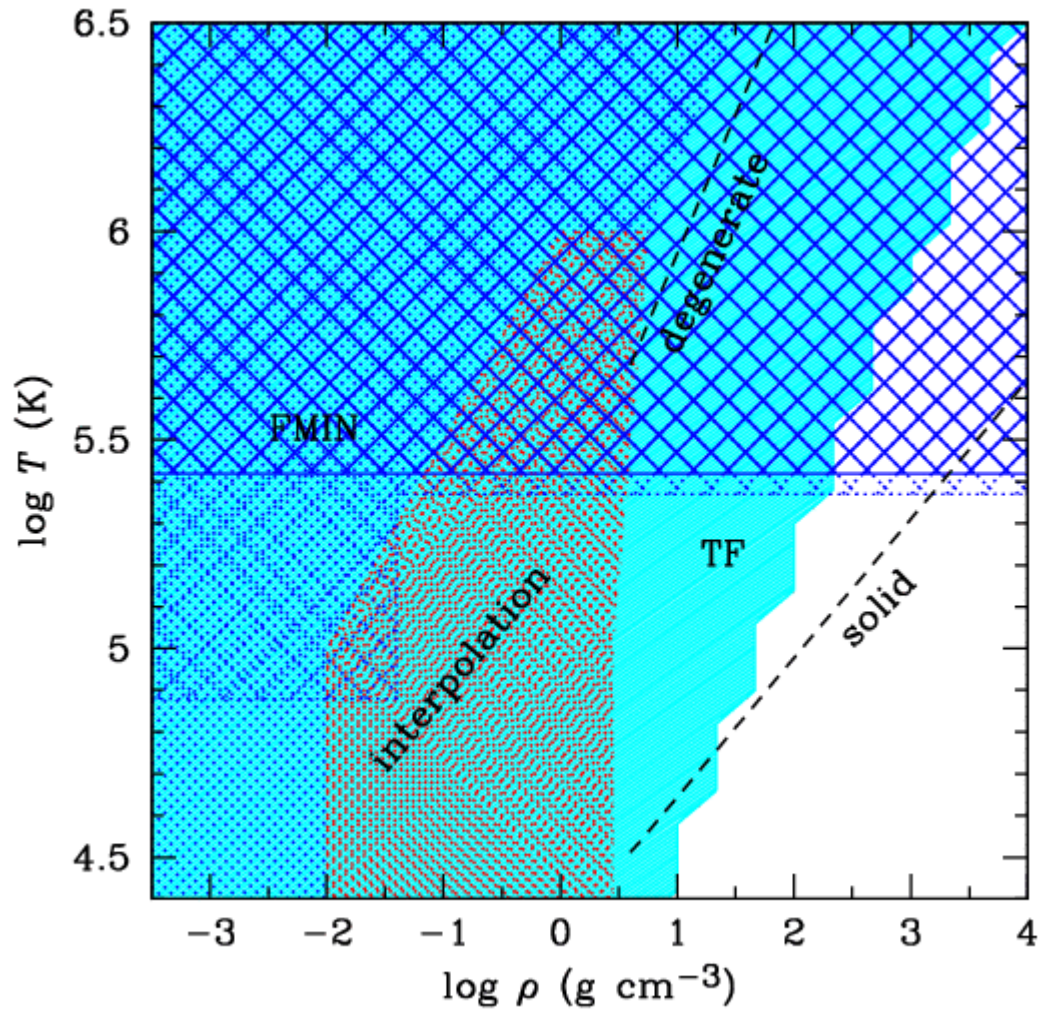
G.Fontaine, H.C.Graboske, Jr., H.M.Van Horn, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **35**, 293 (1977)  
“Equations of state for stellar partial ionization zones” [H-, He-, C-rich ( $\approx 99,9\%$ ) mixtures]

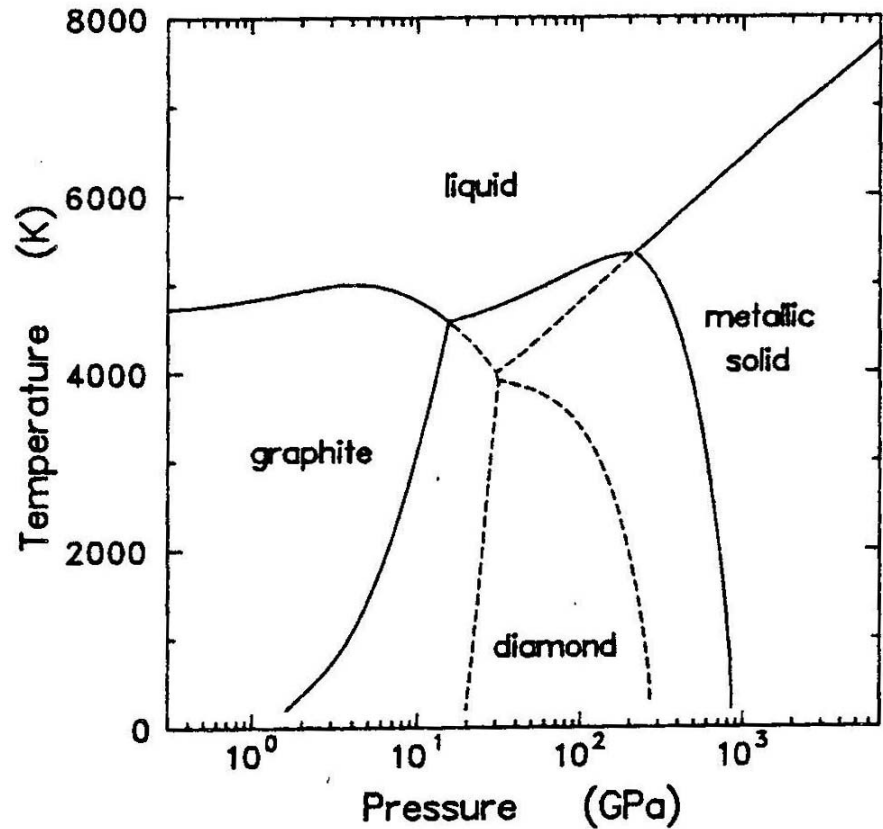


A.Y.Potekhin, G.Massacrier, G.Chabrier, *Phys. Rev. E* **72**, 046402 (2005)  
“Equation of state for partially ionized **carbon** at high temperatures”

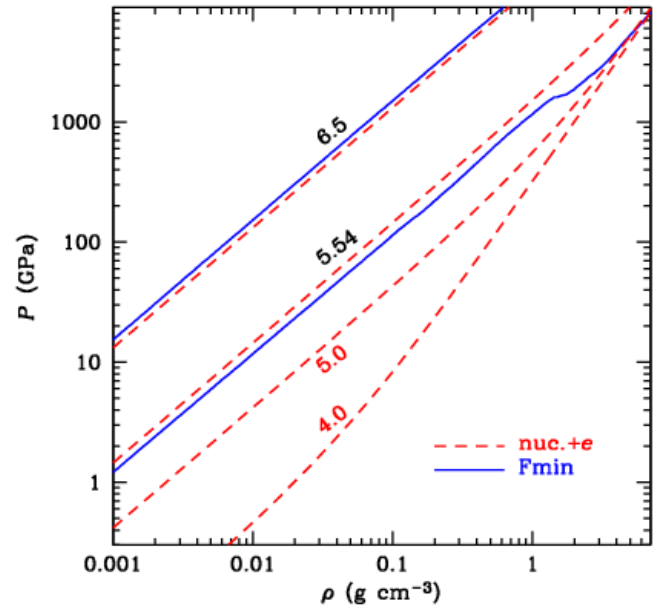


*“Equation of state for partially ionized carbon and oxygen mixtures at high temperatures”*





G.I.Kerley & L.C.Chhabildas,  
*Multicomponent-multiphase equation of state for carbon,*  
 Sandia National Lab., Report SAND2001-2619.



# Метод и теоретическая модель

Метод минимизации свободной энергии; «химическая модель»  
[Haris et al. *Phys. Rev.* **119**, 1832 (1960); Graboske et al. *Phys. Rev.* **186**, 210 (1969)]

$$N_i = \sum_{j\nu} N_{j\nu} \quad \nu = 0 \dots Z_j \quad x_{j\nu} \equiv N_{j\nu}/N_i \quad \sum_{j,\nu} x_{j\nu} = 1$$
$$F_{\text{tot}} = F_e + F_i + F_{\text{ex}} \quad F_{\text{ex}} = F_{\text{Coul}} + F_{\text{int}}$$

## Минимум свободной энергии при постоянном объеме

$$F = \min.$$

Связи:

$$x_{j\nu} \geq 0, \quad \sum_{\nu=0}^{Z_j-1} x_{j\nu} = Y_j, \quad \frac{N_i}{V} \sum_j \sum_{\nu=1}^{Z_j-1} x_{j\nu} \nu_{j\nu} = 1.$$
$$Y_j \geq 0, \quad \sum_j Y_j = 1.$$

## Полностью ионизованная кулоновская плазма

Potekhin A.Y., Chabrier G., *Contrib. Plasm. Phys.* **50**, 82  
(2010) – [и ссылки там!](#)

$$f_{\text{ex}} \equiv \frac{F_{\text{ex}}}{N_i k_B T} = f_{ii} + f_{ie} + Z_j f_{ee}$$

### *a. Обменно-корреляционные эффекты для электронов*

S. Tanaka, S. Mitake, S. Ichimaru, *Phys. Rev. A*, **32**, 1896 (1985);  
S. Ichimaru, H. Iyetomi, S. Tanaka, *Phys. Rep.*, **149**, 91 (1987).

### *b. Корреляции в ОСР;*

### *c. Электрон-ионные корреляции*

Potekhin & Chabrier, *Phys. Rev. E*, **62**, 8554 (2000)

*d. Жидкие кулоновские смеси:* Potekhin et al., *Phys. Rev. E*, **80**, 047401 (2009)

## Вклад связанных состояний

G.Massacrier, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **51**, 221 (1994)

$$H_{j\nu} = \sum_{i=1}^{\nu} h_{j\nu}(\mathbf{r}_i) + W_{j\nu}$$

$$h_{j\nu}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla^2 + V_{\text{at}}^{j\nu}(r) + V_f^{j\nu}(r) \quad W_{j\nu} = \sum_{i=1}^{\nu} \left( -\frac{Z_j e^2}{r_i} - V_{\text{at}}^{j\nu}(r_i) \right) + \sum_{i < k}^{\nu} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|}$$

Одноэлектронный базис:  $h_{j\nu}\psi_{nlm}^{j\nu} = \epsilon_{j\nu nl}\psi_{nlm}^{j\nu}(\mathbf{r})$

$$E_{j\nu\alpha} = E_{j\nu\alpha}^0 + \sum_{(nl)\in\alpha} (\epsilon_{j\nu nl} - \epsilon_{j\nu nl}^0)$$

$\alpha = (nl)_1(nl)_2 \dots (nl)_\nu 2S+1L$

Расщепление уровней – из *Opacity Project*:

M.J.Seaton, *Mon. Not. R. astron. Soc.* **362**, L1 (2005) и [ССЫЛКИ ТАМ](#).

Потенциал свободных электронов  $V_f$  – из волновых функций  $\psi$  в LDA/DFT:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2}\nabla^2 - \frac{Z_{\text{nuc}}e^2}{r} + V_b^\nu(r) + V_f^\nu(r) + V_{\text{xc}}^\nu(r) \right) \psi_{\ell m}^\nu(\mathbf{r}) = \epsilon \psi_{\ell m}^\nu(\mathbf{r})$$

$$\nabla^2 V_b^\nu = -4\pi n_b^\nu, \quad \nabla^2 V_f^\nu = -4\pi n_f^\nu$$

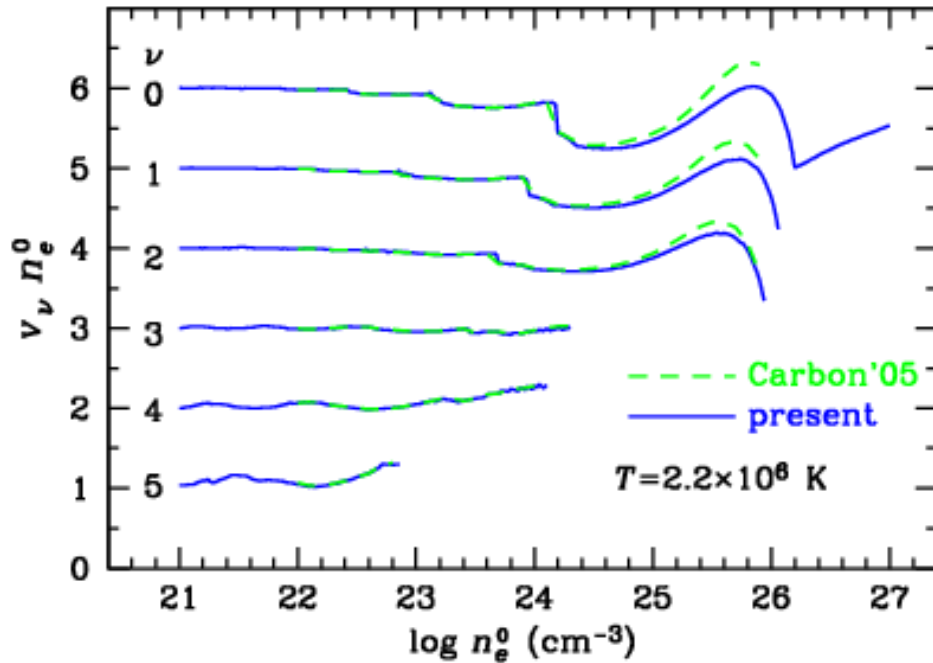
Радиус «сферы нейтральности»  $R_\nu$ :

$$\frac{d}{dr} \left[ -\frac{Z_{\text{nuc}}}{r} + V_b^\nu(r) + V_f^\nu(r) \right]_{r=R_\nu} = 0$$

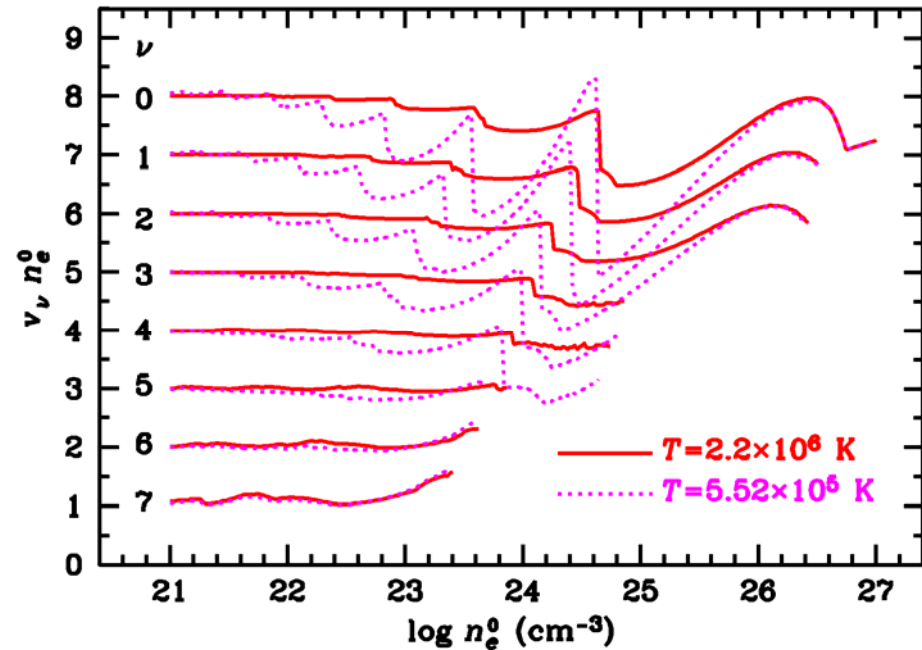
«Объёмы нейтральности»:

$$v_{j\nu} = 4\pi R_{j\nu}^3/3 \quad v_{j\nu}^0 = (Z_j - \nu)/n_e^0$$

Для ионов углерода:



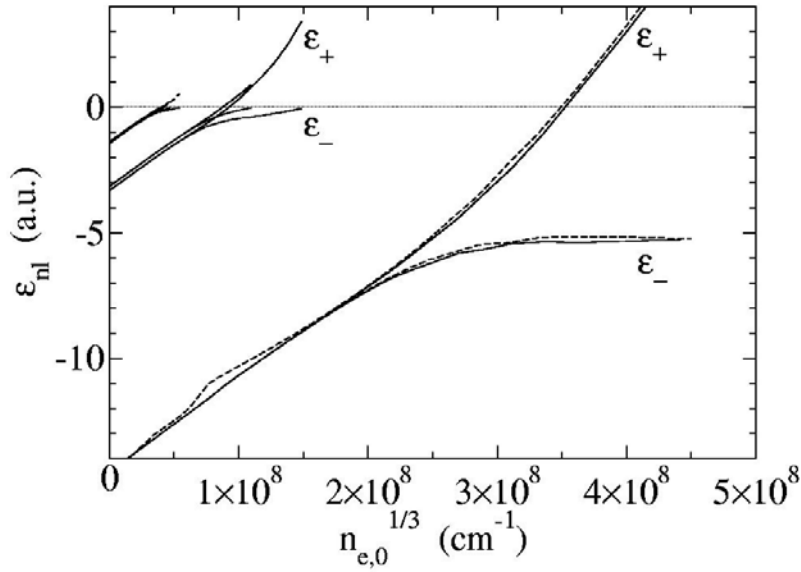
Для ионов кислорода:





«Occupation probabilities» – из уширения уровней энергии с ростом плотности, оцениваемого по влиянию граничных условий на сфере  $R_\nu$ : для  $\epsilon_- < \epsilon < \epsilon_+$ ,

$$w_{\nu\alpha} = \frac{1}{2} - \frac{y}{\pi} \sqrt{1 - y^2} - \frac{1}{\pi} \arcsin(y), \quad y = (\epsilon_+ + \epsilon_-)/(\epsilon_+ - \epsilon_-).$$



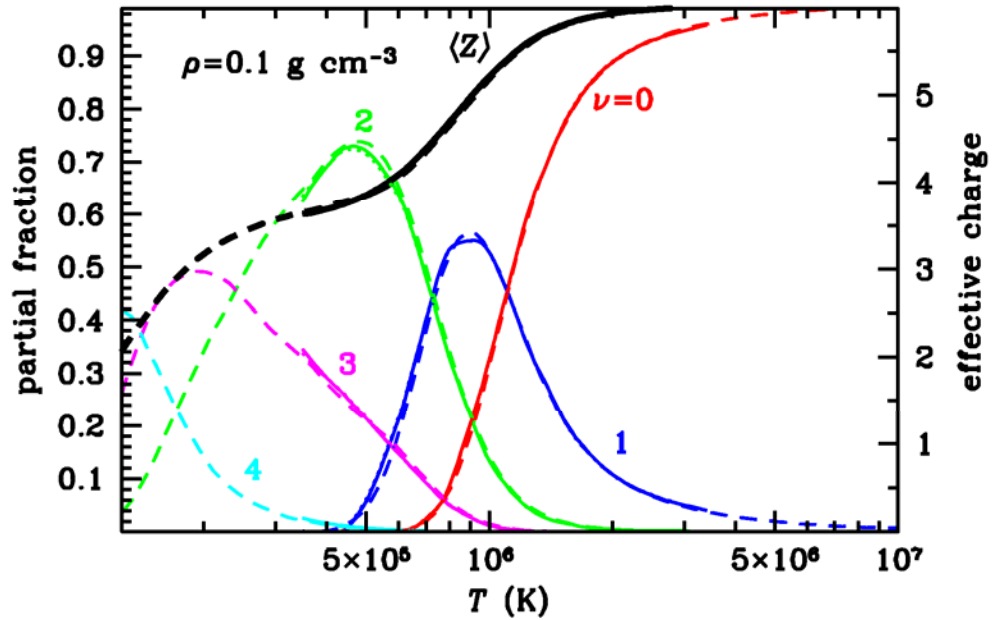
$$w_{j\nu\alpha} = \prod_{(nl) \in \alpha} w_{j\nu nl}$$

$$v_{j\nu}^* = v_{j\nu} w_{j\nu} + v_{j\nu}^0 (1 - w_{j\nu})$$

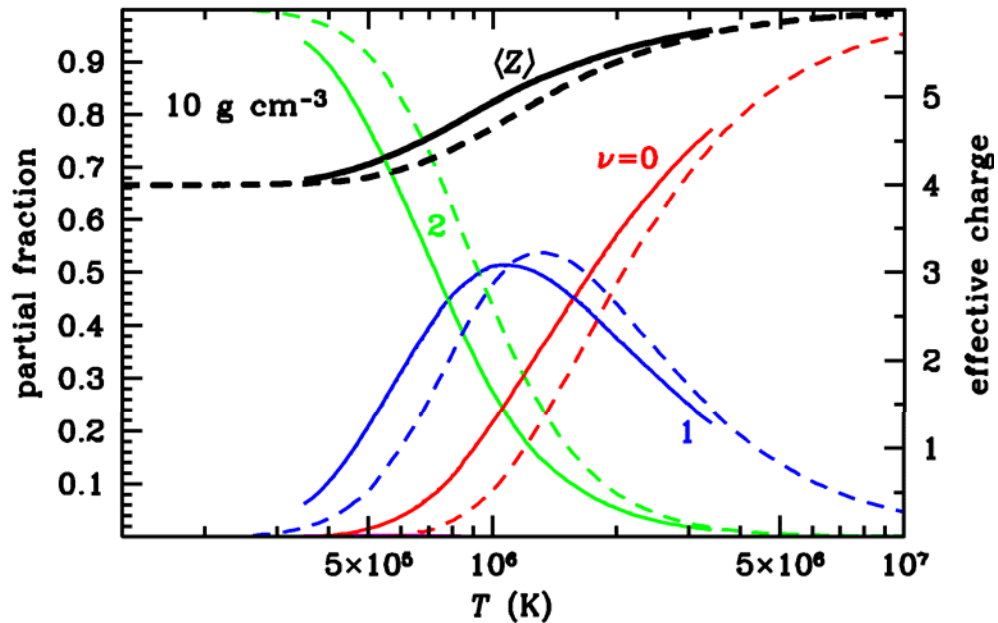
$$F_{\text{int}} = -N_i k_B T \sum_j \sum_{\nu=0}^{Z_j} x_{j\nu} \ln Z_{j\nu}$$

$$Z_{j\nu} = \sum_{\alpha} w_{j\nu\alpha} (2S+1)(2L+1) \exp(-E_{j\nu\alpha}/k_B T)$$

# Ионизационное равновесие

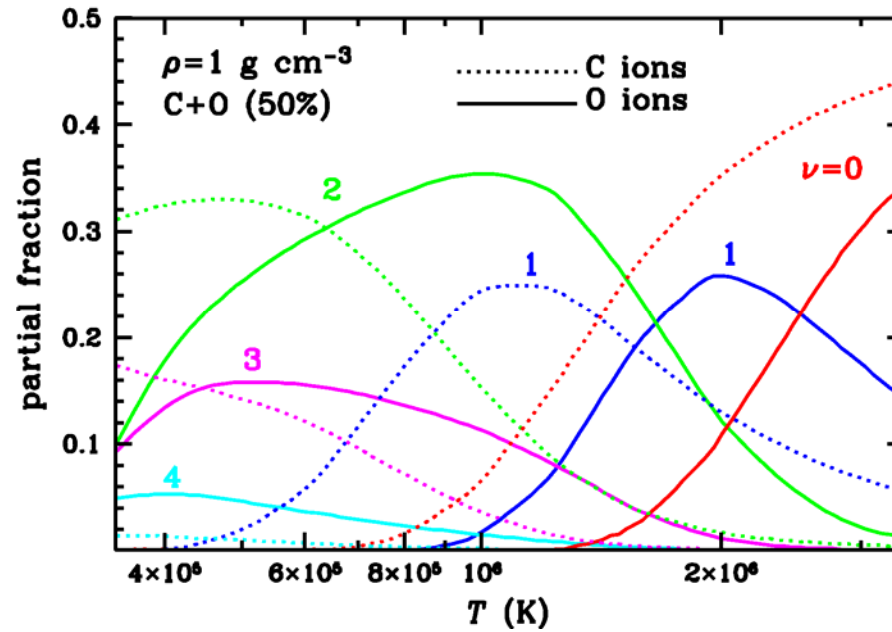


Доли разных ионов углерода и средний эффективный заряд в зависимости от температуры. Пунктир – упрощённая трактовка, предполагающая  $n_e = n_e^0$ .



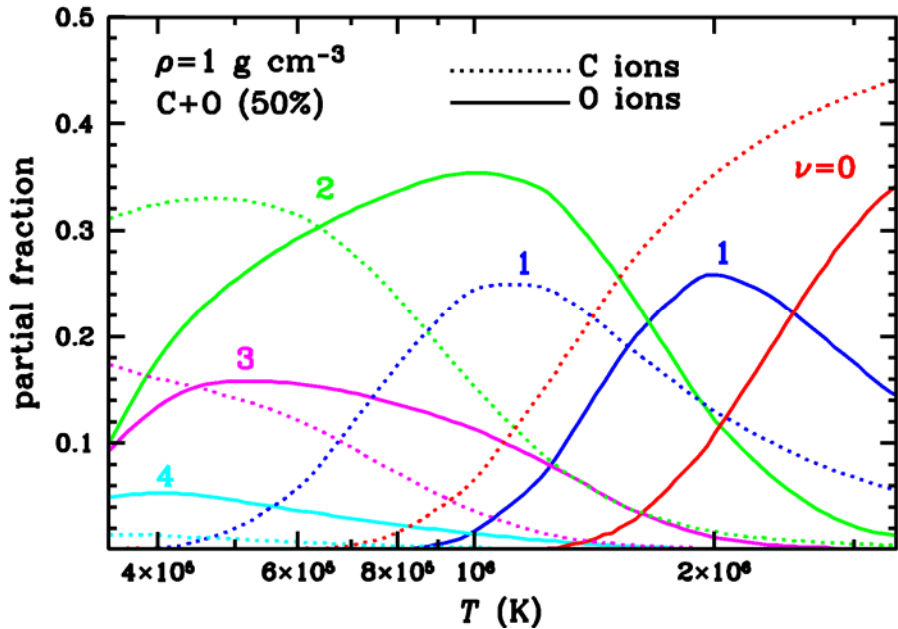
$$\langle Z \rangle = \sum_{j\nu} (Z_j - \nu + 1 - w_{j\nu}) x_{j\nu}$$

# Ионизационное равновесие

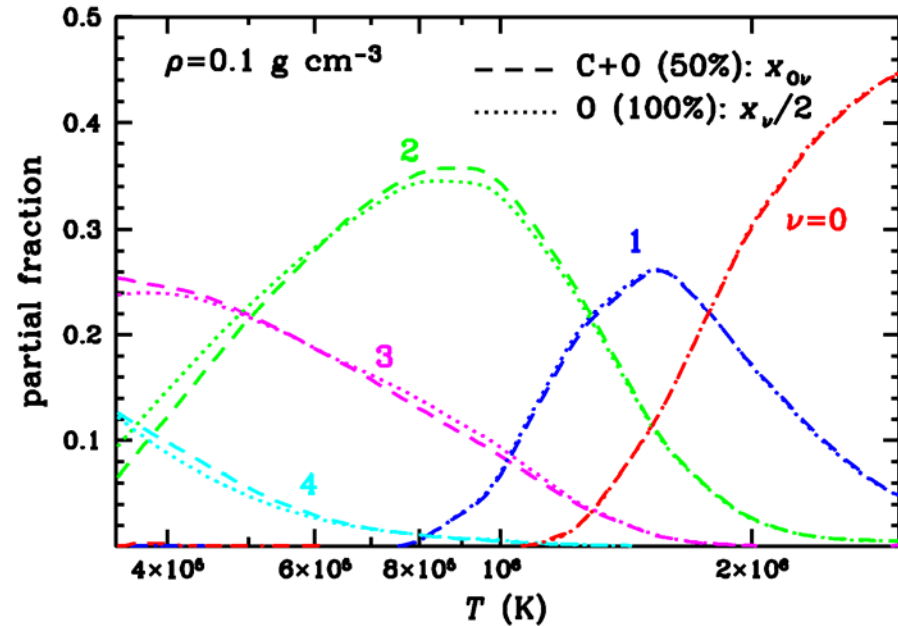


Доли разных ионов углерода и кислорода в смеси в зависимости от температуры.

# Ионизационное равновесие

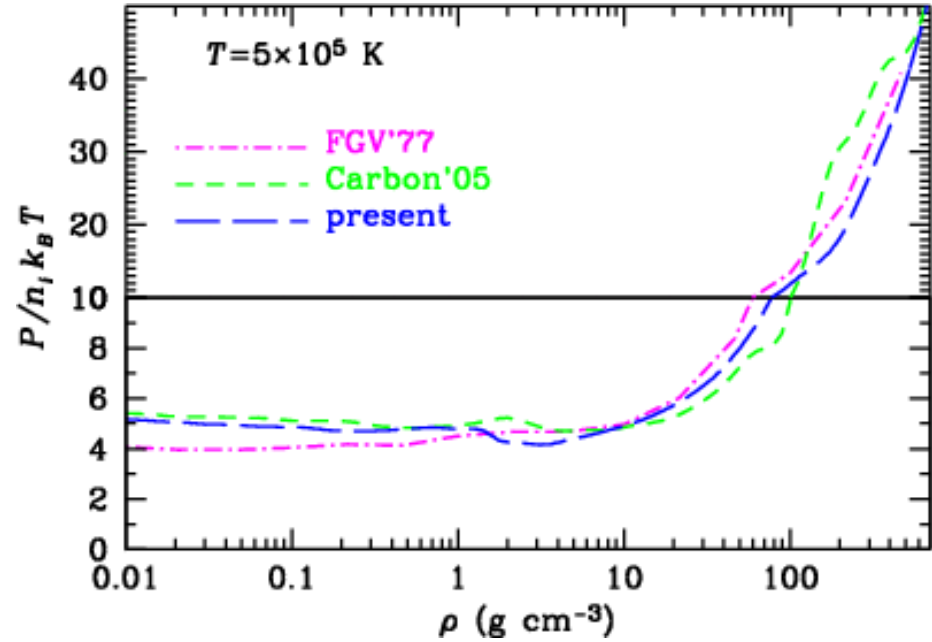
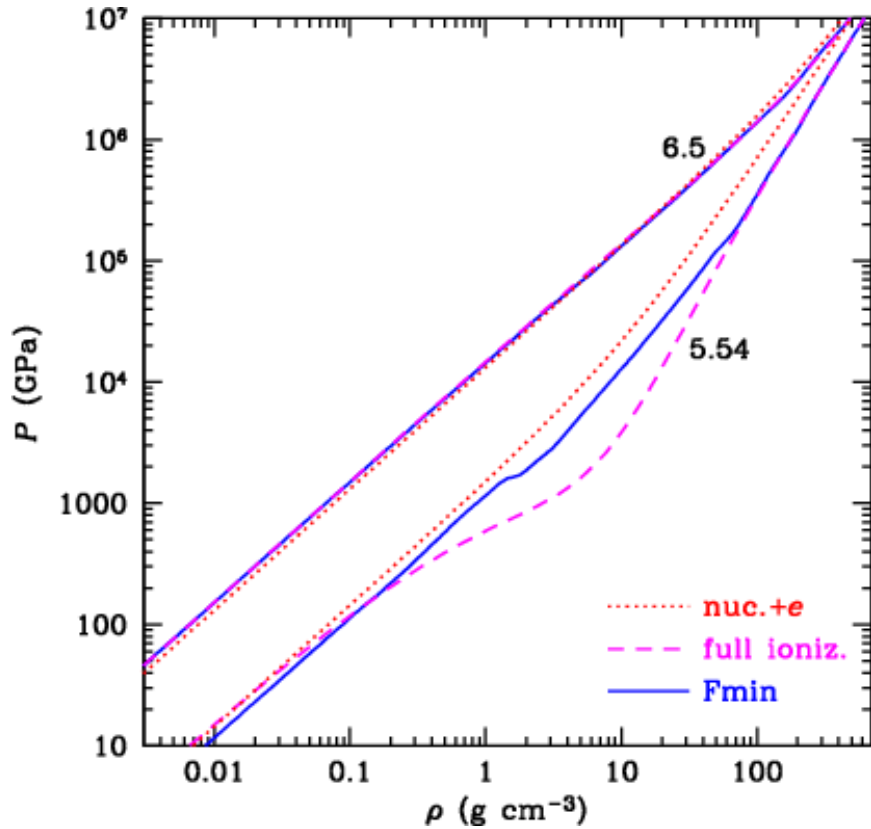


Доли разных ионов углерода и кислорода в смеси в зависимости от температуры.



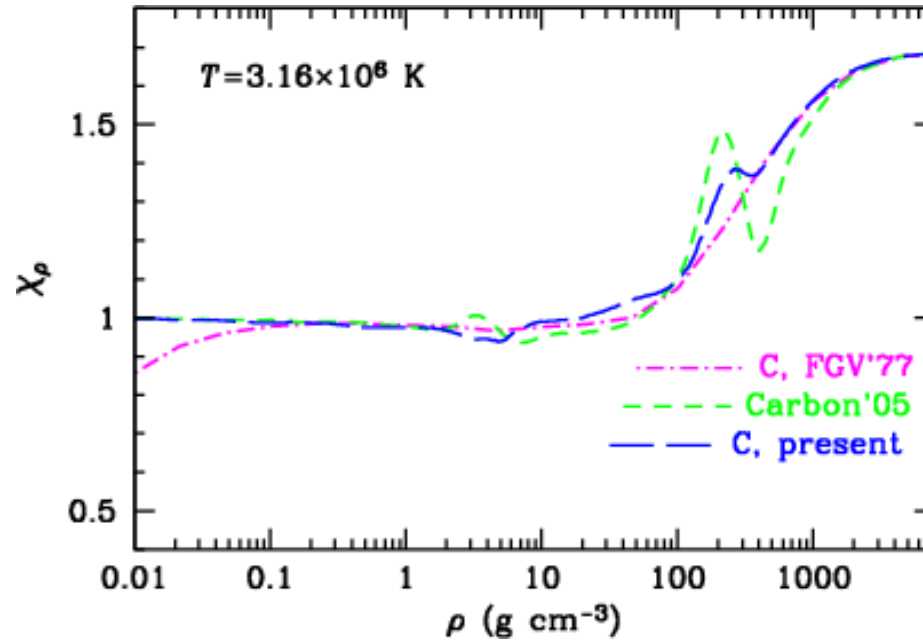
Доли разных ионов кислорода в смеси в зависимости от температуры. Штриховые линии – «точный» расчёт для смеси; точечные линии – приближение, основанное на расчётах для чистых углерода и кислорода.

# Термодинамические функции



Изотермы давления для углерода:  
сравнение моделей.

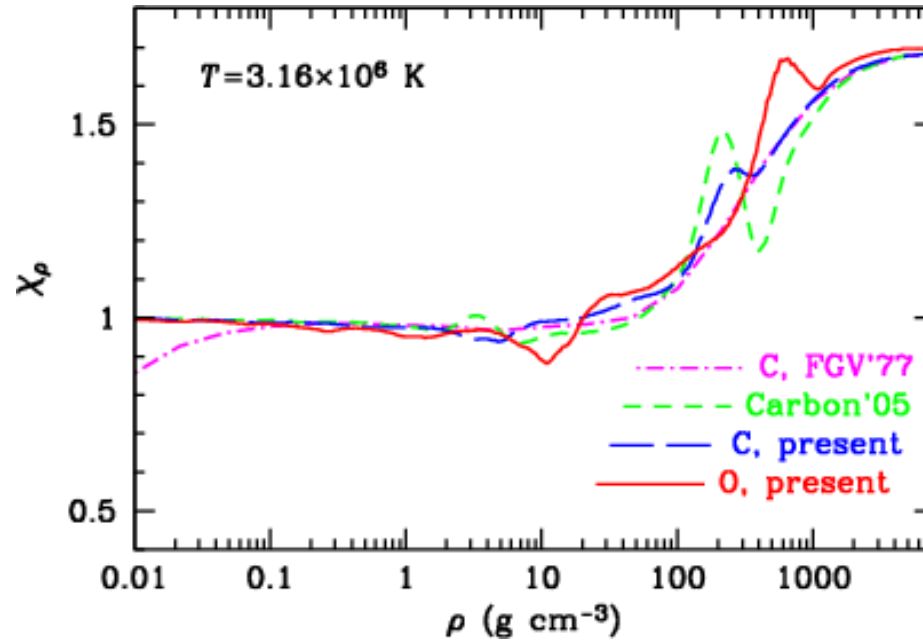
# Термодинамические функции



Изотермы логарифмической производной давления по плотности для углерода (сравнение моделей).

$$\chi_\rho = \partial \ln P / \partial \ln \rho$$

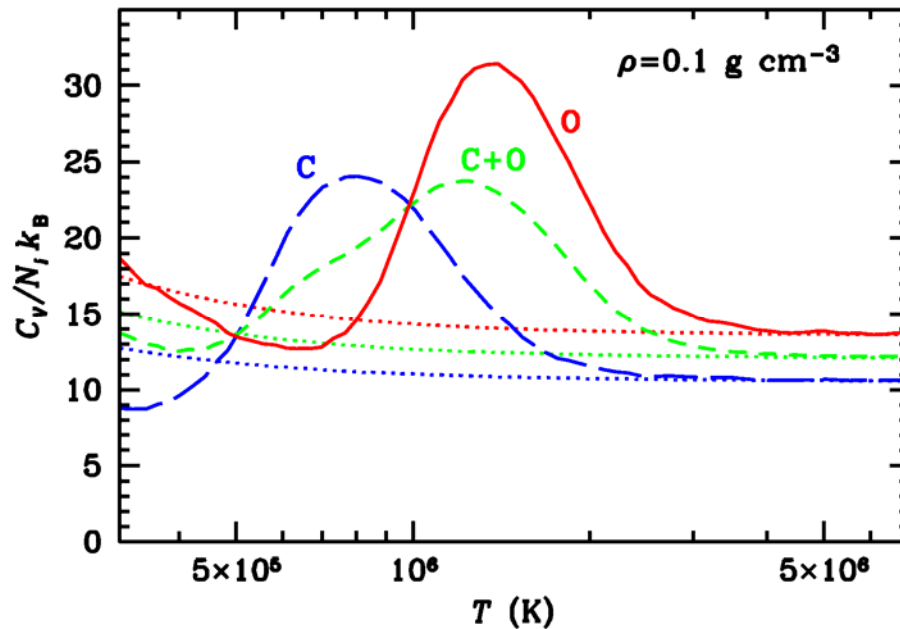
# Термодинамические функции



Изотермы логарифмической производной давления по плотности для углерода и кислорода.

$$\chi_\rho = \partial \ln P / \partial \ln \rho$$

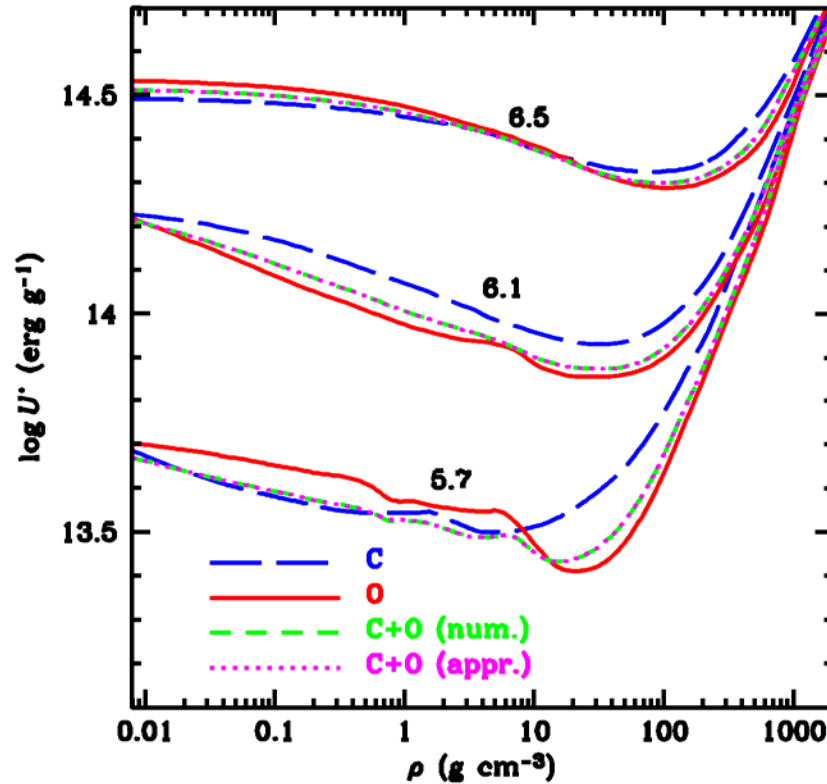
# Термодинамические функции



Изотермы теплоёмкости для углерода (длинные штрихи), кислорода (сплошная кривая) и их смеси в равных объёмах (короткие штрихи). Для сравнения точечные кривые показывают соответствующие результаты для модели полностью ионизованной плазмы.



# Термодинамические функции



Изотермы внутренней энергии для углерода, кислорода и их смеси в равных объёмах. Сравнение приближённого и «точного» расчётов для смеси.

$$U^* = \frac{U + U_0}{N_i \sum_j m_j Y_j} \quad U_0 = \sum_j Y_j U_{0,j}$$

$$U_0(\text{C}) = 8.28 \times 10^{13} \text{ erg g}^{-1}, \quad U_0(\text{O}) = 1.23 \times 10^{14} \text{ erg g}^{-1}$$

## Итоги

- Улучшена разработанная ранее модель свободной энергии частично ионизированной плазмы, детально и самосогласованно учитывающая квантовые состояния атомов в плазме и пригодная для определения термодинамических характеристик плазмы в областях ионизации давлением.
- На основе построенной модели разработана компьютерная программа и произведены расчёты термодинамических функций плотной высокотемпературной углеродно-кислородной плазмы.
- В рассмотренных условиях успешно протестирован простой способ определения уравнения состояния для бинарных смесей на основе расчётов ионизационного равновесия их чистых составляющих.