

УДК 533.9

УЛУЧШЕННЫЙ МЕТОД РАЙЗЕРА ДЛЯ РАСЧЕТА СОСТАВА ПЛАЗМЫ

© 2011 г. М. В. Бураков, член-корреспондент РАН Н. Н. Калиткин

Поступило 04.07.2011 г.

Плазма используется в большом количестве физических и технических конструкций. Для проектирования таких конструкций необходимо знать зависимость термодинамических свойств плазмы от температуры и плотности. Все термодинамические функции легко выражаются через детальный состав плазмы, т.е. концентрации электронов и ионов различной кратности. Поэтому проблема сводится к удобному алгоритму расчета состава плазмы.

Пусть плазма состоит из j -х элементов с относительными концентрациями x_j , относительные концентрации электронов равны x_e , а k -кратных ионов — x_{kj} ($k = 0, 1, \dots, z_j$, где z_j — порядковый номер элемента, а $k = 0$ соответствует нейтральному атому). Для идеальной плазмы состав удовлетворяет уравнениям Саха [1]:

$$\frac{x_e x_{kj}}{x_{k-1,j}} = a_{kj}(T, V) \exp\left(-\frac{\Phi_{kj}}{T}\right), \quad (1)$$

$$a_{kj}(T, V) = \frac{2VG_{kj}}{G_{k-1,j}} \left(\frac{T}{2\pi}\right)^{3/2}, \quad 1 \leq k \leq z_j.$$

Здесь T — температура, V — объем ячейки, приходившейся в среднем на один ион, G_{kj} — статистическая сумма соответствующего иона (все формулы пишутся в атомной системе единиц). Выполняются уравнения баланса числа частиц и зарядов:

$$\sum_j x_j = 1, \quad \sum_{k=0}^{z_j} x_{kj} = x_j, \quad \sum_j \sum_k k x_{kj} = x_e. \quad (2)$$

Для плазмы высокой плотности в (1) могут вводиться поправки на неидеальность. Однако в [2] показано, что в газовой плазме эти поправки невелики. Они существенны лишь тогда, когда плазма начинает переходить в жидкое состояние. Система (1), (2) может содержать огромное число неизвестных, особенно для смесей элементов. Ее можно свести к нахождению нуля функции одной неизвестной x_e [1, 3]. Формально эта функция — многочлен высокой степени, но его коэффициен-

ты громоздко записываются через произведения правых частей (1), а их величины могут различаться на десятки и сотни порядков, что очень осложняет компьютерные расчеты [3]. Поэтому обычно для каждой смеси элементов приходится предварительно вычислять подробные таблицы детального состава плазмы, а потом вставлять их в программы прикладных газодинамических расчетов. Это довольно неудобно.

Для плазмы одного элемента Ю.П. Райзер предложил несложный алгоритм расчета состава [4, 1]. Метод дает удовлетворительные результаты пока ионизация происходит в пределах одной электронной оболочки. При переходе от одной оболочки к другой погрешность метода возрастает существенно, а для слабой ионизации ($x_e < \frac{1}{2}$)

становится огромной. Кроме того, метод не обобщался на случай смеси элементов.

В данной работе предложено усовершенствование метода Райзера, которое повышает его точность до удовлетворительной во всем диапазоне температур и плотностей и обобщается на смеси любого числа элементов. Трудоемкость усовершенствованного метода такая же, как и у исходного. Поэтому его можно использовать для написания подпрограмм, включаемых вместо таблиц в газодинамические расчеты.

УТОЧНЕНИЕ МЕТОДА РАЙЗЕРА

Приближение Райзера относится к плазме одного элемента, так что индекс j можно опускать. При заданных T, V концентрации ионов x_k с увеличением кратности k сначала монотонно возрастают, затем монотонно убывают. Для неплотных газов ($V > 10^4$) эти изменения быстрые, так что распределение по k имеет острый максимум. Особенно проста ситуация, когда на максимуме два иона соседней кратности имеют одинаковые концентрации: $x_{k-1} \approx x_k$. В этом случае концентраци-

Таблица 1. Максимальная и среднеквадратичная погрешности метода Райзера (Р) и улучшенного метода (УР) в процентах при $V = 10^5$ а. е.

Элемент	Погрешности			
	максимальная		среднеквадратическая	
	УР	Р	УР	Р
H	0.00	18.97	0.00	4.80
He	2.19	11.41	0.50	3.03
Li	1.42	47.13	0.29	18.56
Be	2.83	18.56	0.63	6.82
B	2.95	16.81	0.66	5.74
C	3.15	8.24	0.84	3.33
N	3.26	6.70	0.84	2.70
O	3.16	14.12	0.76	3.87
F	3.21	6.87	0.83	2.23
Ne	3.20	5.88	0.80	1.95
Na	3.05	40.39	0.58	14.29
Mg	2.93	14.29	0.80	4.55
Al	3.31	16.18	0.84	4.65
Si	3.55	5.44	1.00	2.02
P	3.57	4.03	0.97	1.65
S	3.55	8.58	0.96	2.22
Cl	3.37	3.70	0.93	1.36
Ar	3.34	3.34	0.87	1.24
K	3.28	35.20	0.76	11.52
Ca	3.05	11.34	0.96	3.27
Sc	3.21	4.99	1.03	1.63
Ti	3.30	3.94	1.04	1.27
V	3.11	5.94	1.03	1.50
Cr	3.11	9.14	1.00	2.15
Mn	3.13	5.44	1.02	1.44
Fe	3.17	4.99	1.01	1.29
Co	3.04	6.41	0.98	1.54
Ni	2.98	8.93	0.94	2.07
Cu	2.71	12.02	0.90	2.83
Zn	2.80	3.89	0.92	1.17
Ga	3.26	18.64	0.90	4.79
Ge	3.70	4.63	1.10	1.32
As	3.78	3.88	1.09	1.18
Se	3.80	7.44	1.05	1.78
LiH	0.82	—	0.15	—

ями прочих ионов можно пренебречь, и из условий баланса (2) следует:

$$x_{k-1} \approx x_k \approx \frac{1}{2}, \quad x_e \approx k - \frac{1}{2}. \quad (3)$$

Уравнение (1) при этом принимает вид

$$x_e \approx k - \frac{1}{2} \approx a_k(T, V) \exp\left(-\frac{\Phi_k}{T}\right). \quad (4)$$

Далее приняты два упрощения. Во-первых, известно, что ионизация слабо зависит от статистических сумм, поэтому полагают $\frac{G_{kj}}{G_{k-1,j}} \approx 1$. Тогда $a_{kj}(T, V)$ вообще не будут зависеть от индексов; далее обозначим их через $a(T, V)$. Во-вторых, уравнения (4) было написано только для целых значений k . Логарифмируем его и обобщим на нецелые значения k следующим образом:

$$\varphi(x_e) = T \ln \frac{a(T, V)}{x_e}. \quad (5)$$

Потенциалы ионизации φ_k известны из экспериментов только для целочисленных значений $k = 1, 2, \dots, z$. Надо построить непрерывную функцию $\varphi(x_e)$ в диапазоне $0 < x_e < z$. Для этого при целых $k = 1, 2, \dots, z$ положим

$$\varphi\left(k - \frac{1}{2}\right) = \varphi_k; \quad (6)$$

при этих значениях аргумента уравнения (4) будут удовлетворяться. На прочих значениях аргумента соотношения (6) обобщаются некоторой интерполяцией или экстраполяцией. Это обобщение подставляется в уравнение (5), и его решение приближенно дает x_e .

Способы интерполяции потенциала в литературе не описаны. Во всех известных нам расчетах их авторы использовали линейную интерполяцию между соседними целыми k (см. рис. 1). Если интерполяция определена, то (5) есть уравнение с одним неизвестным x_e . Его нетрудно решить методом деления пополам и сравнить результаты с решением системы (1), (2).

Результаты этих расчетов при целых и полуцелых значениях $x_e > 0$ почти совпадают с точным решением. При $x_e < 0.5$ погрешность становится огромной: при $x_e \rightarrow 0$ неправильно передаются порядки величин. При переходе ионизации от одной оболочки к другой погрешность также может быть большой. Лишь в пределах ионизации одной оболочки точность удовлетворительна. Это хорошо видно на рис. 2 для Na: при переходе от M- к L-оболочке максимальная погрешность превышает 30%, а от L- к K-оболочке — 3.5%. Иллюстрационные расчеты проводились для $V = 10^5$ а.е., что соответствует концентрации $n \approx 7 \cdot 10^{19}$ см⁻³.

В табл. 1 представлены максимальная и среднеквадратичная погрешности для метода Райзе-

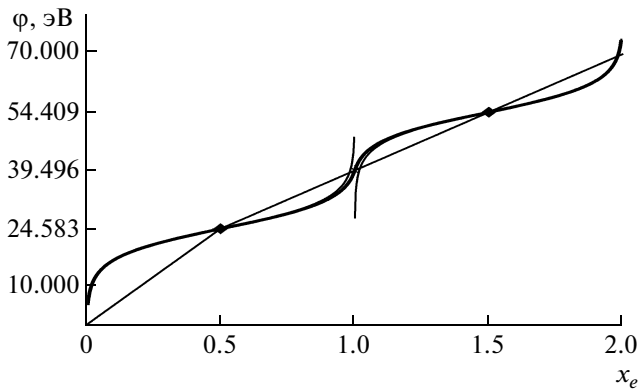


Рис. 1. Потенциалы ионизации He (эВ). Точки – экспериментальные данные, ломаная – интерполяция Райзера, жирная кривая – улучшенная интерполяция при $T = 100$ эВ, тонкие кривые – экстраполяция (8).

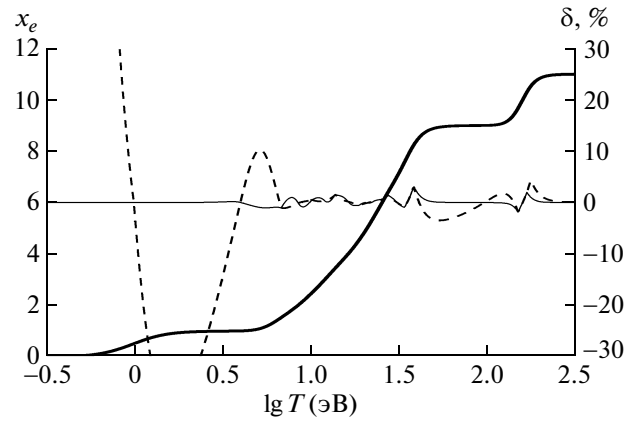


Рис. 2. Ионизация Na для $V = 10^5$ а.е. Жирная линия – степень ионизации, тонкая сплошная – погрешность улучшенного метода, тонкая штриховая – погрешность метода Райзера.

ра, причем они берутся только при $x_e \geq 0.5$ (при $x_e < 0.5$ модель Райзера совершенно непригодна). Табл. 1 охватывает все легкие и средние элементы. Видно, что эти погрешности для ряда элементов, в особенности щелочных металлов, составляют десятки процентов. Это неприемлемо для практических приложений. Возникает потребность в улучшении метода.

УЛУЧШЕННАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Подберем интерполяцию так, чтобы совпадали значения x_e , полученные решением уравнений (1) и (5). Логарифмируя (1) и приравнявая оба значения x_e , получим

$$\varphi(x_e) = \varphi_k + T \ln \frac{x_k}{x_{k-1}}. \quad (7)$$

Поскольку в приближении Райзера другие кратности ионов отсутствуют, то из уравнений баланса (2) получаем $x_k = x_e + 1 - k$, $x_{k-1} = k - x_e$. Подставляя эти значения в предыдущие равенства, найдем вид потенциала, обеспечивающий эквивалентность (1) и (5):

$$\varphi(x_e) = \varphi_k + T \ln \frac{x_e + 1 - k}{k - x_e}, \quad k - 1 < x_e < k. \quad (8)$$

Зависимость (8) показана на рис. 1. Она существенно отличается от линейной интерполяции, однако ее график обращается в бесконечность при $x_e \rightarrow k - 1$ и $x_e \rightarrow k$. Поэтому в качестве интерполяции она непригодна: не обеспечивается непрерывность при переходе к соседним интервалам.

Напомним, что метод Райзера с линейной интерполяцией дает почти точный результат при целых и полужелых значениях x_e . Попробуем изменить зависимость (8) вблизи границ интервала так,

чтобы при $x_e = k$ получить значение $0.5(\varphi_k + \varphi_{k+1})$. Удачной оказалась следующая интерполяция:

$$\varphi(x_e) = \varphi_k + T \ln \frac{x_e + 1 - k + \varepsilon_k}{k - x_e + \varepsilon_k}, \quad (9)$$

$$\varepsilon_k = \left[\exp \frac{\varphi_{k+1} - \varphi_k}{2T} - 1 \right]^{-1}, \quad k - 0.5 \leq x_e \leq k.$$

Для полуинтервала $k - 1 \leq x_e \leq k - 0.5$ строится аналогичное выражение с использованием φ_{k-1} вместо φ_{k+1} .

Интерполяциями (9) целесообразно пользоваться при $0.5 \leq x_e \leq z - 0.5$. Для крайних полуинтервалов $0 \leq x_e \leq 0.5$ и $z - 0.5 \leq x_e \leq z$ следует пользоваться экстраполяцией (8). Поведение этой интерполяции также показано на рис. 1. При улучшенной интерполяции алгоритм не усложняется: уравнение (5) решается по-прежнему дихотомией.

Интерполяция (8), (9) оказалась нетривиальной – она включает явную зависимость от температуры! Численные расчеты убедительно показывают ее преимущество. На примере Na на рис. 2 видно, что исчезают большие погрешности при переходе от одной оболочки к другой; погрешности же при ионизации одной оболочки остаются небольшими. Сводные данные по легким и средним элементам представлены в табл. 1. Ни на одном из элементов максимальная погрешность не превышает 4%, а среднеквадратичная – 1.2%, в то время как в исходном методе Райзера они в 10–15 раз больше. Видно, что точность предложенного метода вполне достаточна для использования в прикладных расчетах.

СМЕСИ ЭЛЕМЕНТОВ

Для смеси элементов наряду с полной концентрацией электронов x_e надо вводить парциальные

концентрации электронов x_e ; это те концентрации электронов, которые были бы если бы j -й элемент занимал все пространство. Для них выполняется уравнение баланса:

$$f(x_e) \equiv x_e - \sum_j x_j x_{ej}(x_e) = 0. \quad (10)$$

Уравнение Райзера (5) для смеси элементов примет вид

$$\varphi_j(x_{ej}) = T \ln \frac{a(T, V)}{x_e}. \quad (11)$$

Здесь в правой части стоит полная концентрация электронов, а в левой — зависимость потенциала ионизации j -го элемента от парциальной концентрации электронов. Эту зависимость выбираем в виде улучшенной интерполяции (9), где при φ и x_e надо поставить индекс j . Интерполяция (9) легко обращается:

$$\begin{aligned} x_{ej}(\varphi_j) &= k - \frac{1 - [\gamma_{kj}(\varphi_j) - 1] \varepsilon_{kj}}{\gamma_{kj}(\varphi_j) + 1}, \\ \gamma_{kj}(\varphi_j) &= \exp \left[\frac{\varphi_j - \Phi_{kj}}{T} \right], \\ \varepsilon_{kj} &= \left\{ \exp \frac{\Phi_{k+1,j} - \Phi_{kj}}{2T} - 1 \right\}^{-1}, \\ \Phi_{kj} &\leq \varphi_j \leq \frac{\Phi_{k+1,j} + \Phi_{kj}}{2}. \end{aligned} \quad (12)$$

Обратная интерполяция, как и прямая, является монотонной, но ее первая производная немонотонна и лишь кусочно-непрерывна.

Отсюда следует алгоритм вычисления $f(x_e)$. Зададим произвольное x_e . Подставляя его в правую часть (11), вычислим φ_j ; заметим, что при таком вычислении оно оказывается одинаковым для всех элементов. Подставляя найденное φ_j в правую часть (12) поочередно для всех j , вычислим $x_{ej}(x_e)$. Подставляя последние значения в сумму (10), найдем $f(x_e)$. Можно показать, что в диапазоне $0 < x_e < \sum_j z_j x_j$ функция $f(x_e)$ монотонно возрастает от $-\infty$ до некоторого положительного значения.

Следовательно, уравнение (10) имеет единственный корень.

Этот корень легко вычислить методом дихотомии. Трудоемкость вычислений такая же, как и для одного элемента. Применение метода Ньютона неэффективно из-за разрывности производной.

В качестве примера был проведен расчет смеси LiH, где оболочечные эффекты выражены очень резко. Максимальная и средняя погрешности для $V = 10^5$ а.е. приведен в табл. 1. Для сравнения приведен расчет с линейной интерполяцией вместо (12). Видно, что и для смесей предложенный метод дает хорошие результаты.

ИОННЫЙ СОСТАВ

Для ионов j -х элементов в приближении Райзера одновременно присутствуют ионы только двух кратностей, ближайших к парциальной концентрации x_{ej} . Обозначим k_j целую часть x_{ej} . Тогда отличны от нуля только следующие концентрации ионов:

$$x_{k_j,j} = x_j(k_j + 1 - x_{ej}), \quad x_{k_{j+1},j} = x_j(x_{ej} - k_j). \quad (13)$$

Давление и внутренняя энергия в расчете на средний атом смеси соответственно равны:

$$\begin{aligned} p &= \frac{(1 + x_e)T}{V}, \\ E &= \frac{3}{2}(1 + x_e)T + \sum_j \sum_{k=k_j}^{k_{j+1}} x_{kj} \sum_{l=1}^k \varphi_{lj}. \end{aligned} \quad (14)$$

Остальные термодинамические потенциалы можно восстановить отсюда с помощью термодинамических соотношений. Все термодинамические потенциалы будут непрерывными функциями T, V . Однако их производные (к которым относится, например, теплоемкость) могут иметь небольшие разрывы, когда парциальные электронные концентрации оказываются целыми или полужелыми числами. Это следует помнить при использовании данных формул в газодинамических программах.

Работа поддержана грантом РФФИ 11-01-00102.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных газодинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. // Физика плазмы. 2010. Т. 36. № 12. С. 1–11.
3. Калиткин Н.Н., Царева Л.С. // ЖВМиМФ. 1971. Т. 11. № 3. С. 782–783.
4. Райзер Ю.П. // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. В. 5. С. 1583–1585.