



Workshop "Non-Ideal Plasma Physics"

Moscow, Russia, December 9-10, 2021



Int. Conf. "Plasma physics and controlled fusion"

Zvenigorod, Russia, 2021

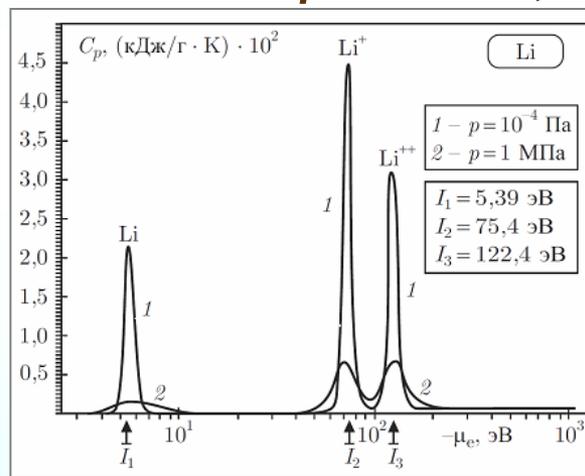
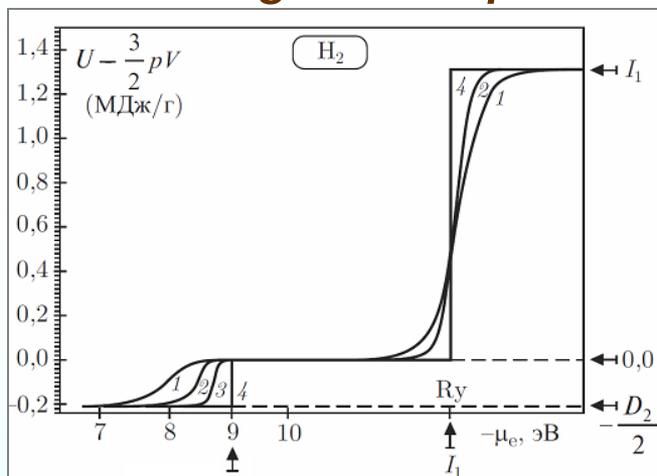
PNP-1999, Greifswald

Семинар памяти А.Н.Старостина (ТРИНИТИ, 03/2021)

PNP-2009, Chernogolovka

European Thermodynamics Conference
Niels Bohr Institute,
Copenhagen, June 2009

Термодинамика газо-плазменного состояния в низкотемпературном ("вакуумном") пределе *Thermodynamics of gaseous plasma in zero-temperature (vacuum) limit*



Igor Iosilevskiy & Victor Gryaznov

Joint Institute for High Temperature (Russian Academy of Science)
Institute of Problems of Chemical Physics (Russian Academy of Science)
Moscow Institute of Physics and Technology (State University)



[arXiv:1403.8053](https://arxiv.org/abs/1403.8053)



[arXiv:1504.0585](https://arxiv.org/abs/1504.0585)



Посвящается памяти нашего товарища, коллеги и друга –
Андрея Никоновича Старостина



Андрей Старостин

16 апреля 2020

Давняя нерешенная проблема

Проблема обоснования “Химической” модели плазмы
т.е. корректного перехода от “Физической”
к “Химической” модели плазмы

или

Строгий вывод “Химической модели плазмы”
из “Физической модели”.

Исторический комментарий

30 – 40 лет назад:

Игорь Львович - (как председатель одного из заседаний Сессии по Неидеальной плазме в Москве...)

- Проблема корректного вывода “Химической модели плазмы” из “Физической модели” – не только до сих пор не решена, но и не поставлена !!

NN (уважаемый и авторитетный коллега...)

– Игорь Львович ошибается... (просто он, к сожалению, не следит за литературой, ...)

– Проблема корректного вывода “Химической модели” из “Физической” – не только поставлена, но и давно уже решена,... причем даже не одним, а несколькими авторами...

Физическая и Химическая модели плазмы

Химическая модель \Leftrightarrow “рабочая лошадь” подавляющего большинства прикладных расчетов термодинамики неидеальной плазмы в реальных высокоэнергетических устройствах (*реакторы, взрывы, разряды, планеты и звезды и др.*)

- **Нулевое приближение** – идеальный газ большого количества квазичастиц – “свободных” атомов, молекул, атомарных и молекулярных ионов... вплоть до “свободных” ядер и электронов (e.g. H , e^- , H_2 , H , H_2^+ , H_3^+ ... etc) и даже макромолекул и микрокапель ...
- **Условность** разделения всех состояний двоек, троек, и т.д. частиц на “связанные” и “свободные” ...

Неидеальность: Все взаимодействия (*всех со всеми!*) – “эффективные” (т.е. “исправленные” как на близких, так, порой, и на далеких расстояниях например, дебаевский потенциал вместо кулоновского при вычислении связанных состояний (OPAL)) но зато гораздо более “слабые” чем исходное кулоновское взаимодействие ядер и электронов

- **Важнейшие элементы описания:** - Статистические суммы, учитывающие вклад внутренних степеней свободы всех связанных комплексов в условиях плотного плазменного окружения

Физическая и Химическая модели плазмы

Физическая модель \Leftrightarrow строгий подход (*ab initio*).

Нулевое приближение – идеальный газ ядер (+Z) и электронов (-e)

- Никакой эмпирической информации не используется (!)

- Все связанные комплексы (e.g. H , H_2 , H^- , H_2^+ , H_3^+ ... etc) – суть вычислительно сложные фрагменты суммарной конструкции – $\Delta F_{неид}$ – описывающей эффекты кулоновского взаимодействия ядер и электронов (*m.e. неидеальности*)

Разработка газофазного ядерного реактора (1950- 1980)

НВ!! - Теплофизические Свойства

Термодинамика, перенос, оптика ...

Смеси из:

U + H + Li + K + Na + ...

Давления:

$P \sim 1 \leftrightarrow 1000$ бар

Температуры:

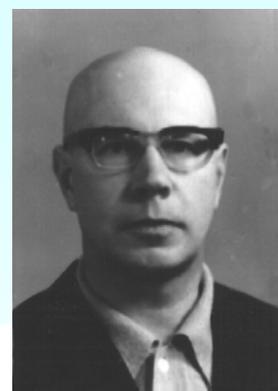
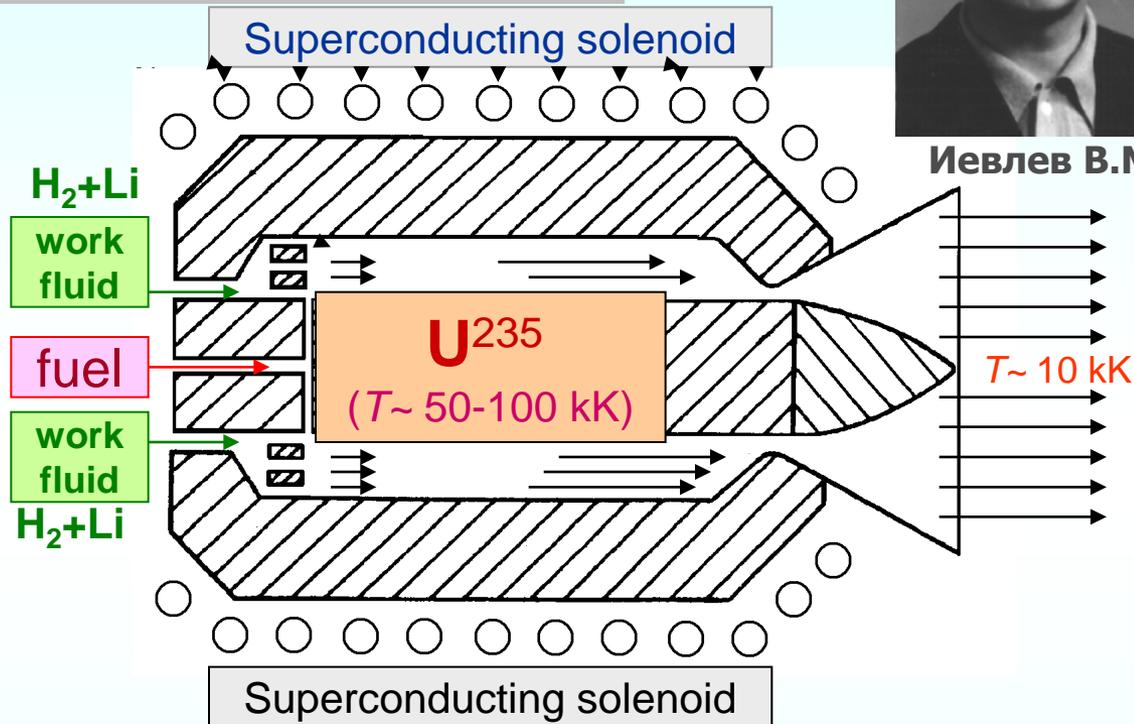
$T \sim 1 \leftrightarrow 100$ кК

Фазовые переходы = !!

- (1) “Обычные” –
- типа “Газ-жидкость”
- (2) - Гипотетические
“Плазменные”,
“Диссоциативные” и др
– ??

Прежде всего в Уране

!!



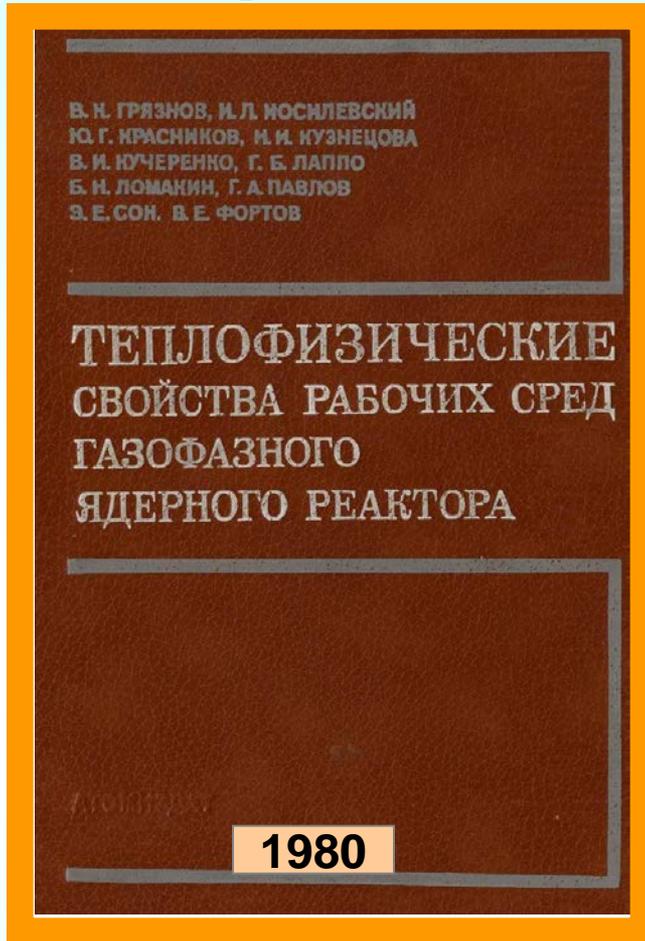
Иевлев В.М.

Высокотемпературный вариант ГФЯР

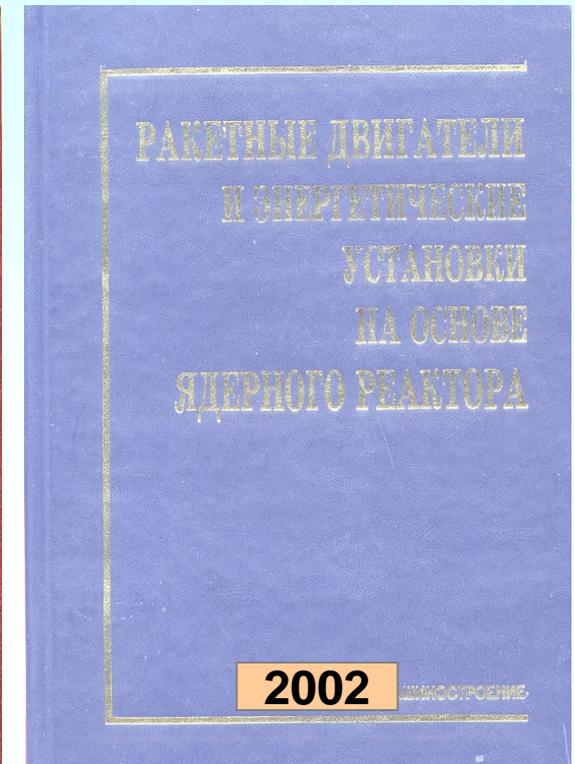
Иевлев В.М. *Известия АН СССР (Энергетика)* (1977)

В.Грязнов, И.Иосилевский, Э.Сон, В.Фортов, и др.
“Теплофизика газофазного ядерного реактора” (1980)

Теплофизика Газофазного Ядерного Реактора



Ядерные ракетные
двигатели
Москва, 2001

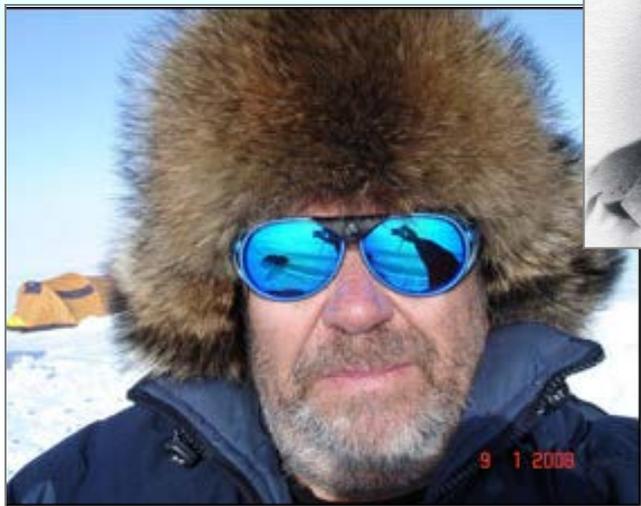


Ракетные двигатели и
энергоустановки с
газофазным ядерным
реактором (2002)

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б.Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортвов В.Е. *Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора* // Ред. В.М.Иевлев (Москва: 1980)

“Ракетные двигатели и энергоустановки на основе газофазного ядерного реактора”,
ред. А.С.Коротеев, Москва, (2002)

Владимир Е. Фортов

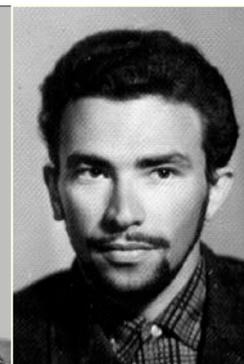
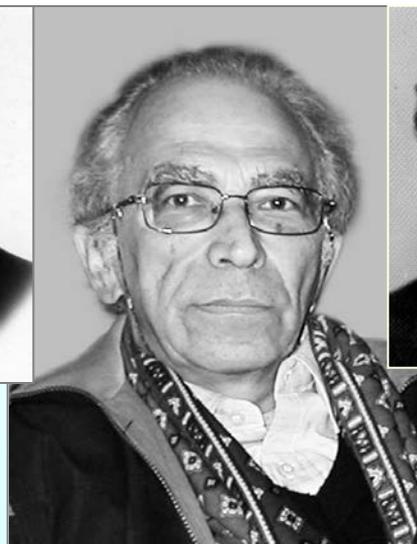


Эдуард Е. Сон



17 08 2021

29 ноября 2020



Виктор Грязнов

Игорь Иосилевский

Евгений Нестеров

В чем проблема

**Статистическая термодинамика
сильно-неидеальных кулоновских систем**

Суперпозиция двух отдельных проблем (!)

**Проблема
“Многих Тел”**

**Двойная сингулярность
Кулоновского потенциала:**
*Бесконечное притяжение
при $r \rightarrow 0$
Неинтегрируемость
при $r \rightarrow \infty$*

**Проблема учета
Квантовых Эффектов**

- Нелокальность (электронов)
- Корреляция распределений по импульсам и координатам
- Эффекты квантовой статистики

Есть опыт в том, как преодолевать каждую * по-отдельности

Общепринятый подход к решению проблемы

Развиваемое специально для кулоновских систем сложное “пересуммирование” модифицированного асимптотического разложения по степеням активности $z \equiv \exp\{\mu/kT\}$ справедливого в пределе $z \rightarrow 0$ при $T = const$ (т.е. $\mu_e; \mu_i \rightarrow -\infty$) с целью продвижения в область высокой плотности ...

Веденов А.А., Ларкин А.И. ЖЭТФ 36, (1959)

$$\beta P(\zeta, T) = \{\beta P(\zeta)\}^{IDEAL} + \Delta^{RING}(\zeta, T) + \zeta^2 B_2(\zeta, T) + \zeta^{5/2} B_{5/2}(\zeta, T) + \dots$$
$$\dots + \zeta^k B_k(\zeta, T) + \zeta^{m/2} B_{m/2}(\zeta, T) + \dots$$

$(\zeta \rightarrow 0) \dots (\mu \rightarrow -\infty) \dots (T = const)$

Старостин А.Н. Термодинамика неидеальной плазмы
Диссертация (к.ф.м.н.) Москва: НИИЯФ МГУ, (1971)

Старостин А.Н., Рерих В.К., ЖЭТФ, **127** (2005)
Сходящееся уравнение состояния плазмы водорода без таинств

Старостин Андрей Никонович (1940 – 2020)



Один из тех, кто внес большой вклад в решение Проблемы *квантовой неидеальной плазмы* в рамках Физической модели

В рамках пересуммирования “плазменного” разложения по степеням активности модифицировал известный результат Планка-Ларкина и вычислил (для водорода) более точное самосогласованное асимптотическое “сходящееся” выражение для “конечной” статсуммы атома – “Статсумма Старостина”

$$Q_{\text{Starostin}}(\zeta, T) \sim F(\zeta, T)$$

Красников Юрий Георгиевич (1930 – 2003)



Красников Ю.Г. - Один из тех, кто заметно продвинулся в аналитическом решении проблемы неидеальной плазмы в рамках Физической Модели –

- Вычислил (для водорода) член $\sim \zeta^{5/2}$ модифицированного плазменного разложения

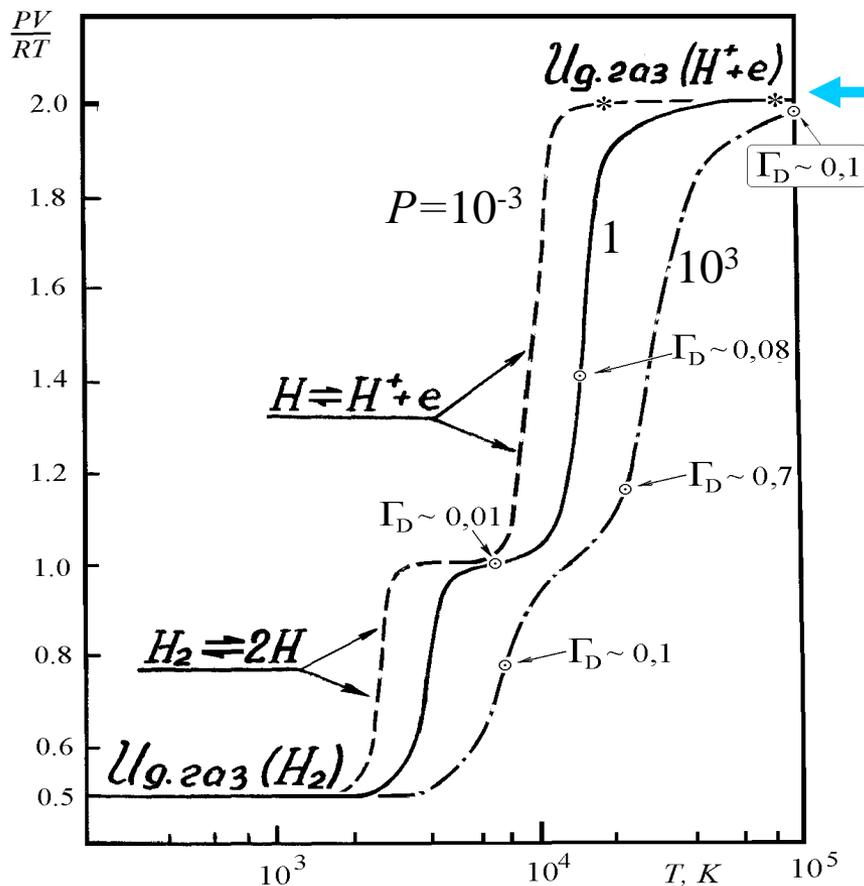
$$\beta \Delta P(\zeta, T) \sim \zeta^{5/2} B_{5/2}(\zeta, T)$$

Красников Ю.Г. *ЖЭТФ* **53**, 2223 (1967) // *ЖЭТФ* **73**, 516 (1977)

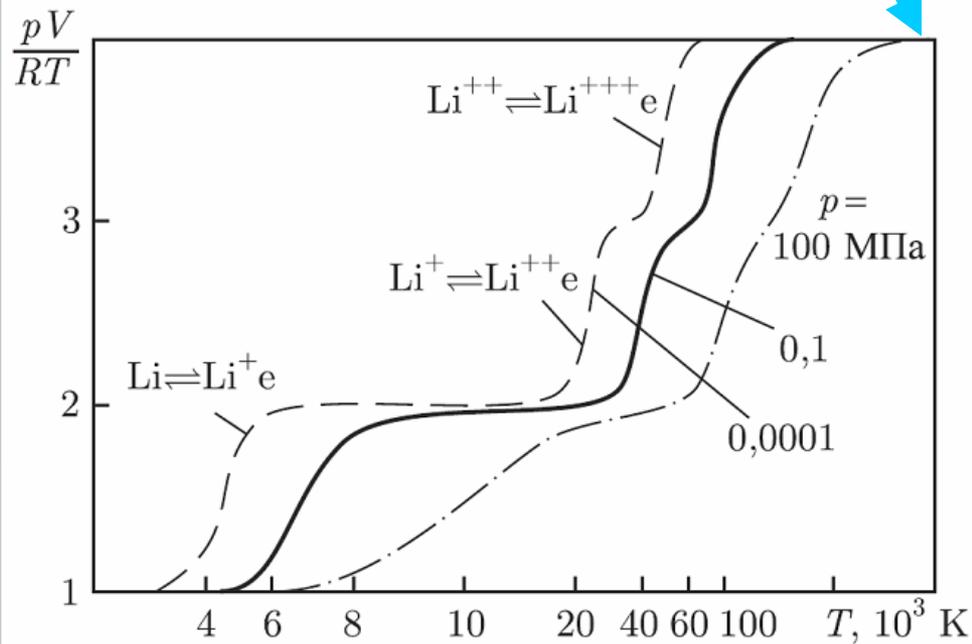
Красников Ю.Г. Энциклопедия низкотемпературной плазмы / Гл. ред. В.Е. Фортов (М.:Физматлит, 2004) /Том приложений III-1 (Ред. А.Старостин, И.Иосилевский)

ТЕРМИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДА И ЛИТИЯ - $P(\rho, T)$

“Полосы” ионизации и диссоциации (на изобарах – 0.001; 1; 1000 бар)



“Нулевое приближение” – Идеальный газ ядер и электронов ($n \rightarrow 0$) ($T = const$)

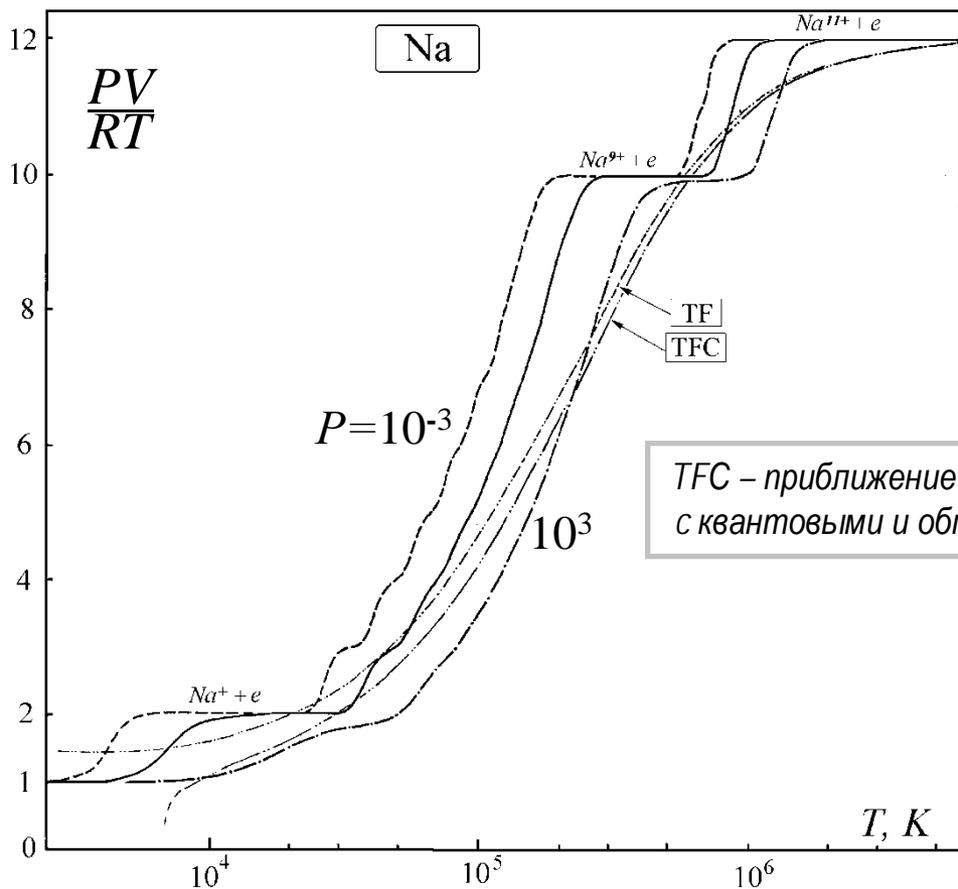


Чем разреженней плазма, тем четче проступает “лестничная” структура

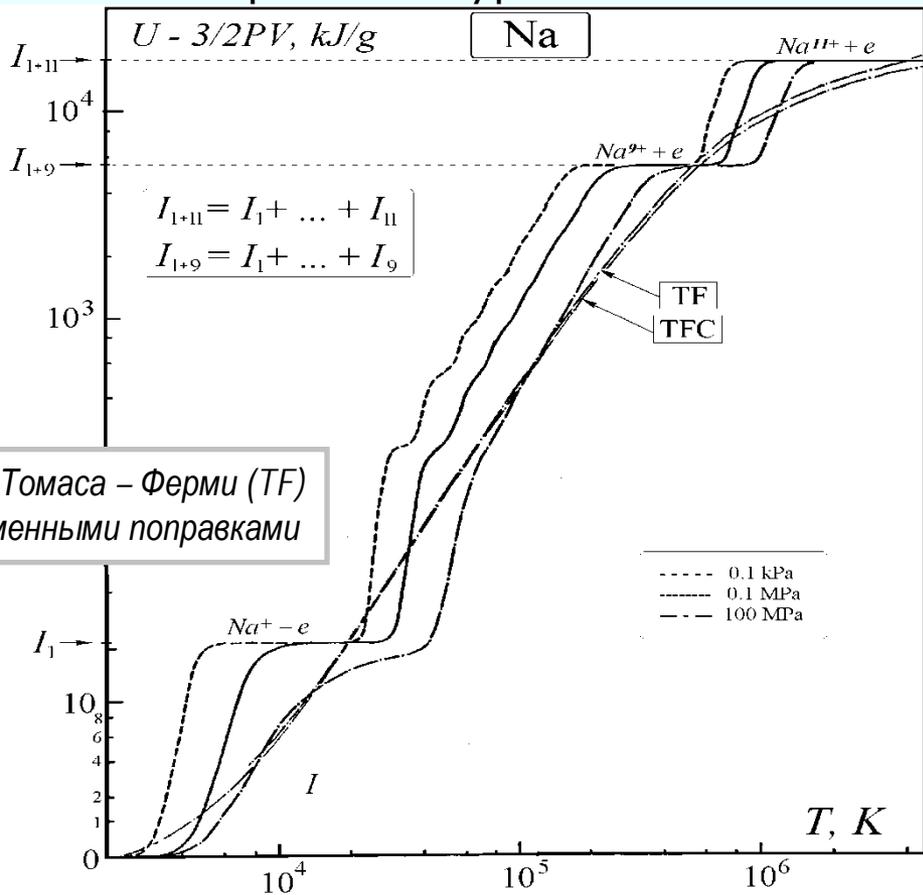
Термическая и калорическая лестницы ионизации Идентичная структура!

(Иосилевский И.Л., Грязнов В.К. NPP-1979, Рига)

Термическое уравнение состояния

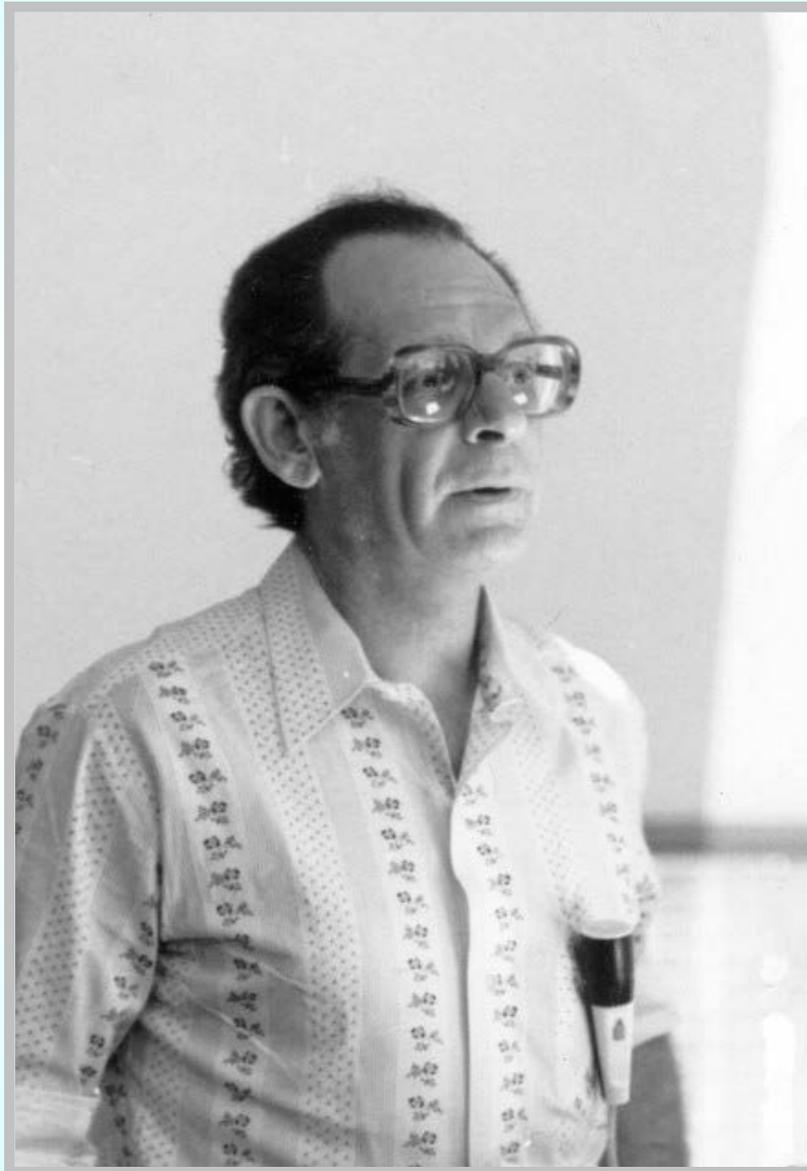


Калорическое уравнение состояния



“... Картинки Иосилевского и Грязнова - красивые, но бесполезные !...”
(В.П. Копышев – NPP-1979, Рига)

Давид Абрамович Киржниц

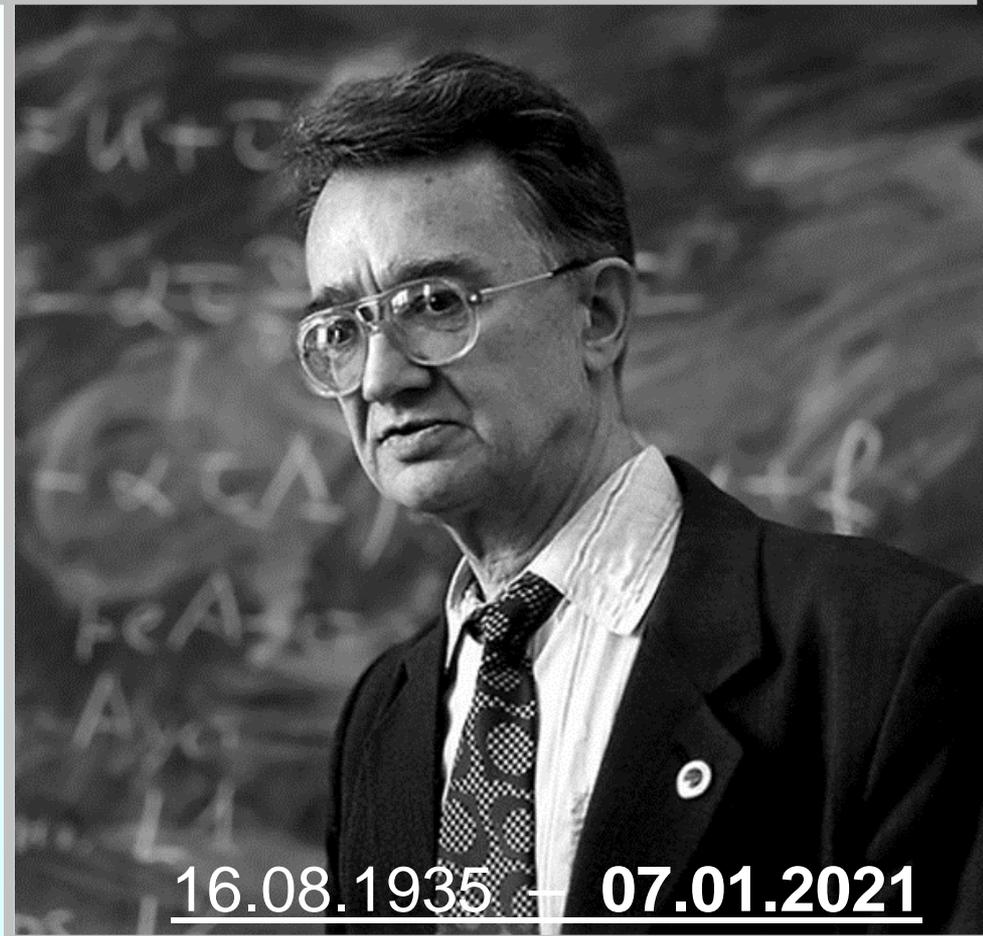


13.10.1926 – 04.05.1998

В 1978 году открыл первый “Эльбрус” лекцией “Термодинамика Черных Дыр”

Николай Николаевич Калиткин

Рыцарь Ордена “Томаса – Ферми”
(с квантовыми и обменными поправками)



16.08.1935 – 07.01.2021

Проблемы на пути строгой теории

Наложение трех источников, затрудняющих решение задачи

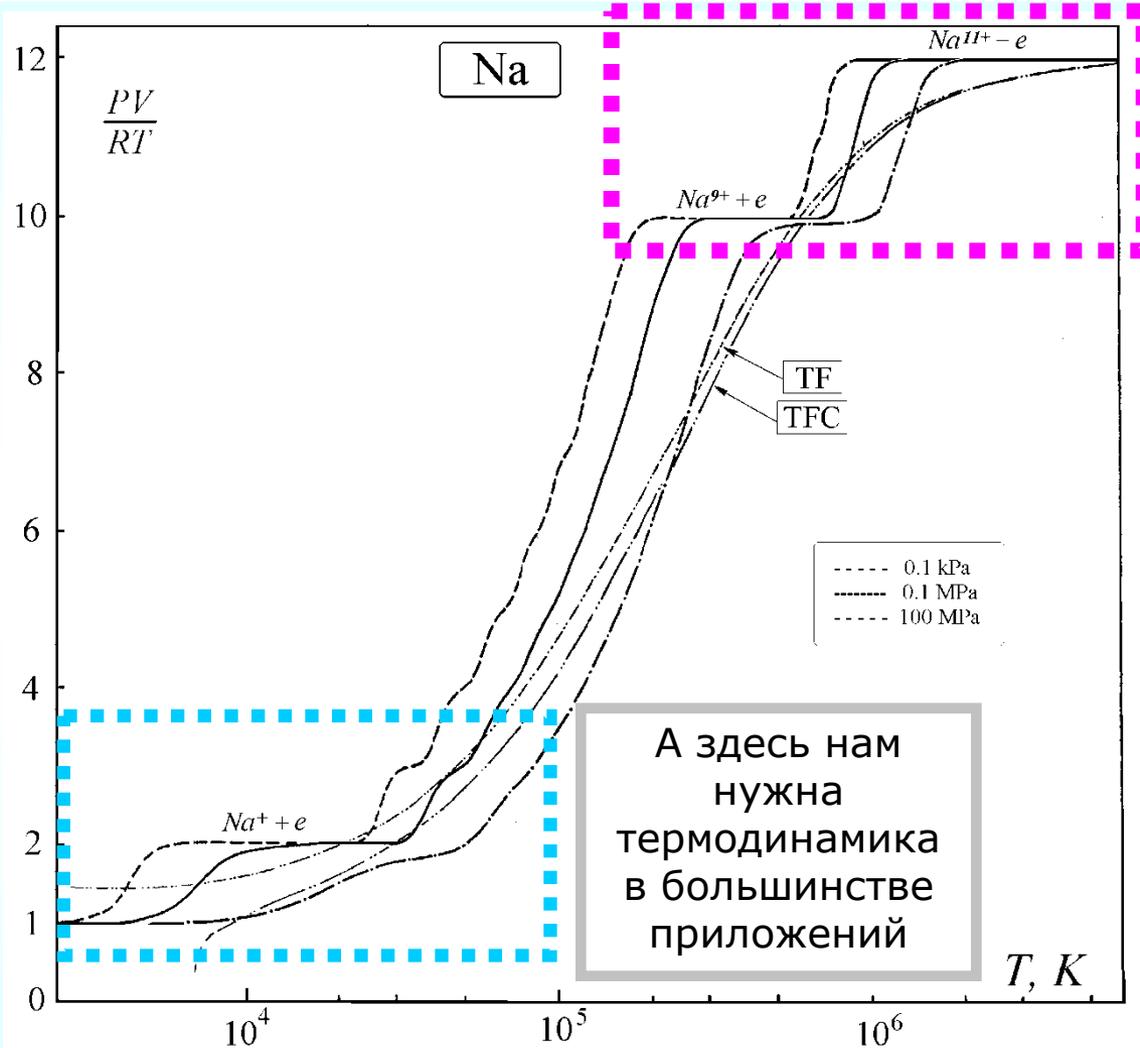
- Дальнодействие Кулоновского потенциала (*при $r \rightarrow \infty$*)
- Бесконечное притяжение ядер и электронов (*при $r \rightarrow 0$*)
- Квантовые эффекты

Эта суперпозиция делает безнадежным (*мнение авторов!*) продвижение строгой теории дальше модифицированного приближения “второго группового коэффициента” в аппарате плазменного разложения по степеням активности...

Т.е. безнадежным (*мнение авторов!*) является построение строгого эквивалента известной “сходящейся” статсуммы Планка – Ларкина (тем более – статсуммы Старостина) уже для **атома гелия** (He) и **молекулы водорода** (H₂), не говоря уже о плазме более тяжелых элементов, практически важных в областях далеких от идеального газа ядер и электронов...

Термическое уравнение состояния плазмы натрия

“Оболочечные осцилляции”



Здесь “заперта”
строгая аналитическая теория

А здесь нам
нужна
термодинамика
в большинстве
приложений

Иосилевский И.Л., Грязнов В.К. ТВТ 19 (1981)

О сравнительной точности термодинамического описания свойств газовой плазмы в приближениях Томаса – Ферми и Саха

Нерешенная проблема

Строгий вывод “Химической модели плазмы”
из “Физической модели”.

Предлагаемое решение

Асимптотическое разложение по асимптотической
системе функций от **температуры**

$$\sim f_i(\mu, T) = A_i(\mu) \cdot \exp\{-b_i(\mu)/T\}$$

при **фиксированном значении $\mu(n, T)$**

Но при таком подходе **нулевым приближением** является

“Лестница ионизации”

(во ВСЕМ диапазоне значений химического потенциала !)

т.е. в “Вакуумном пределе”

Вакуумный предел – что это такое?

Термодинамика в двойном пределе: $T \rightarrow 0$ & $\rho \rightarrow 0$ ($n \rightarrow 0$)

$(\mu \rightarrow const)$

Вакуумный предел – термин

Варианты:

Молекулярный предел (*D. Brydges & Ph. Martin – J. Stat. Phys. 113, 1999*)
(*Hydrogen*) (*A. Alastuey, V. Ballenegger, Ph. Martin – J. Stat. Phys. 130, 2008*)

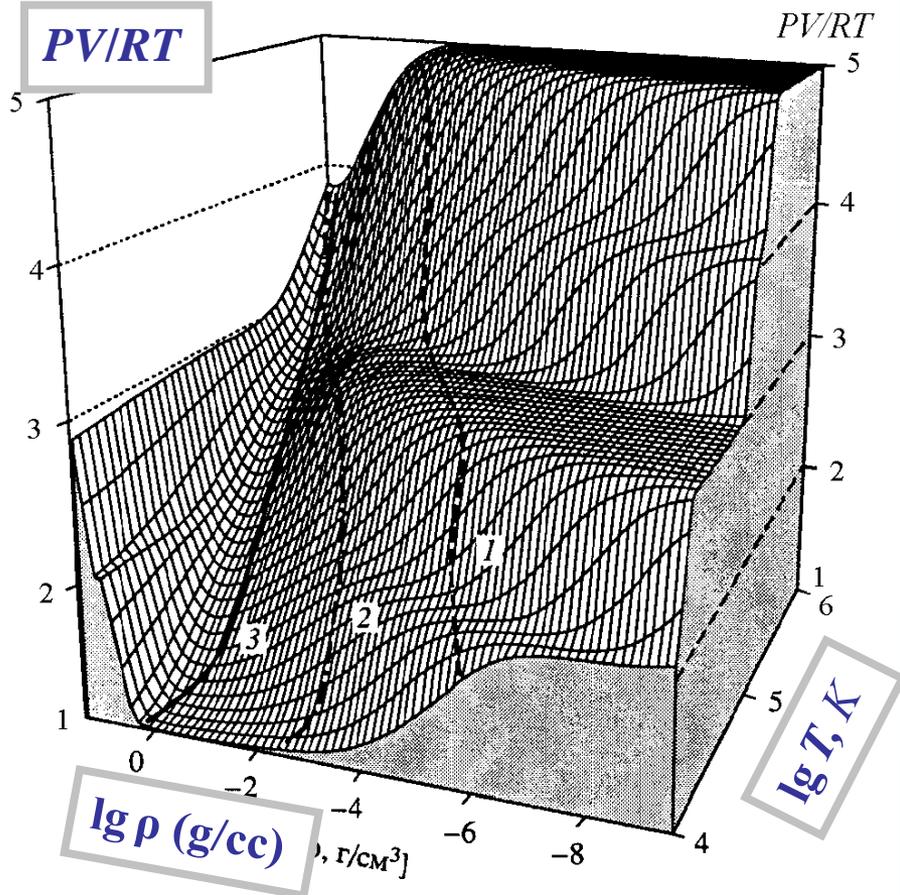
САНА-limit (*Иосилевский – PNP_1999*)

ХМП-предел (ХМП = *Хим. Модель Плазмы*) (Энциклопедия НТП, 2004)_

“Вакуумный” ионизационный переход – (*С. Триггер, А. Хомкин, ТВТ, 2011*)

Вакуумный предел – в чем смысл

Термодинамика плазмы бериллия
 “Долина неидеальности”

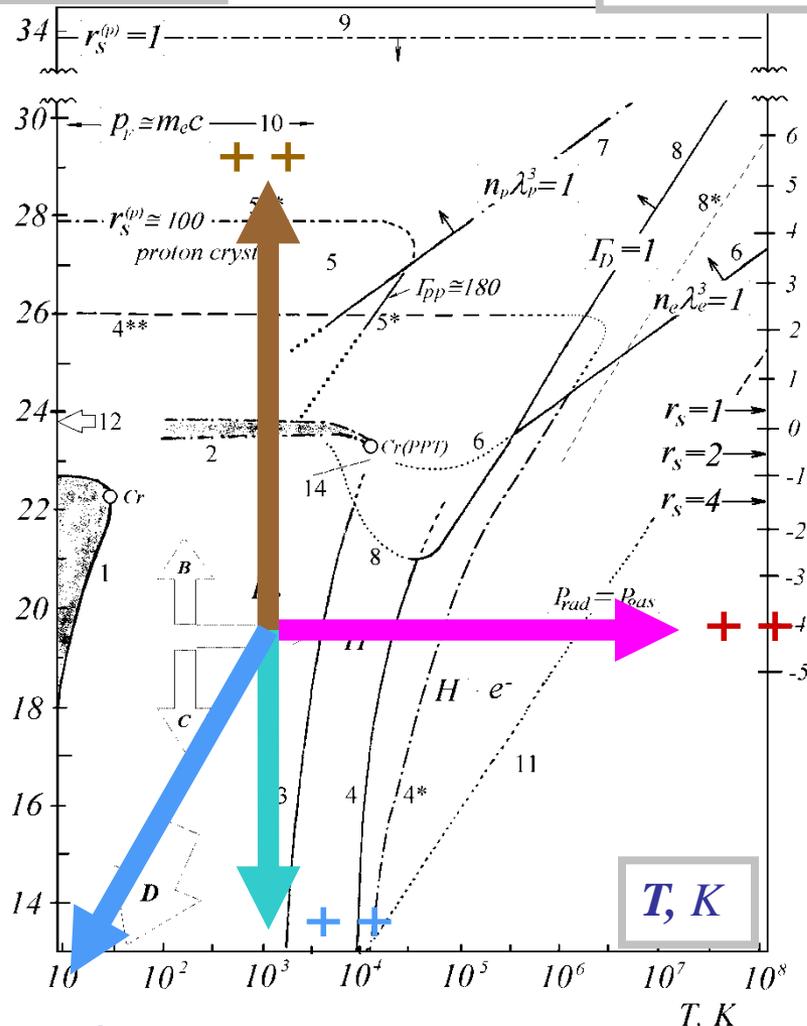


1 - $\Gamma_D = 0.1$ 2 - $\Gamma_D = 1$ 3 - $n_e \lambda_e^3 = 1$

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. (код SAHA)
 Энциклопедия НТП (Ред. В.Е.Фортов) 2000

$\lg N \text{ (cm}^{-3}\text{)}$

$\lg \rho \text{ (g/cm}^3\text{)}$



Фазовая диаграмма водорода

Иосилевский И.Л. Энциклопедия НТП
 (Ред. В.Е.Фортов) 2000

Вакуумный предел. В чем проблема?

Точка $\{T = 0 \text{ и } n = 0\}$ – это **особая точка** термодинамики

А именно: - предел $\{T \rightarrow 0 \ \& \ n \rightarrow 0\}$ является **условным!**

Т.е. часть термодинамических величин в этом пределе зависит от способа перехода к пределу (например. *химический потенциал* и др.)

Иллюстрация:

Химический потенциал идеального ферми-газа электронов

$$\text{Lim}_{n \rightarrow 0, T = \text{const}} \{ \text{Lim}_{T \rightarrow 0, n = \text{const}} \mu_e^\circ(T, n) \} = 0$$

$$\text{Lim}_{T \rightarrow 0, n = \text{const}} \{ \text{Lim}_{n \rightarrow 0, T = \text{const}} \mu_e^\circ(T, n) \} = -\infty$$

Меняя способ перехода к пределу $\{T \rightarrow 0 \ \& \ n \rightarrow 0\}$, для хим-потенциала можно получить любую величину между **0** и $-\infty$

Решение:

Именно химический потенциал является искомым управляющим параметром в вакуумном пределе

Theoretical Background

Simplification ($T \rightarrow 0$)

(1)

$$P/kT \rightarrow \zeta_Z + \zeta_e + \zeta_Z \zeta_e^1 A_1(T) \exp\{\beta I_{Z-1}\} + \dots \zeta_Z \zeta_e^k A_k(T) \exp\{\beta(I_{Z-1} + I_{Z-2} + \dots + I_{Z-k})\} + \dots \quad (1)$$
$$(\zeta_j \equiv \exp\{\beta\mu_j\}/\lambda_j^3)$$

- Whole interval: $\{-I_{Z-1} < \mu_e < 0\}$ is divided into subintervals in the limit $T \rightarrow 0$.
- Only one term dominates in the limiting form of activity expansion (1) within each subinterval.
- Change of the dominating term occurs when:

$$\mu_e = -I_k \quad (k = 1, 2, 3, \dots, Z-1)$$

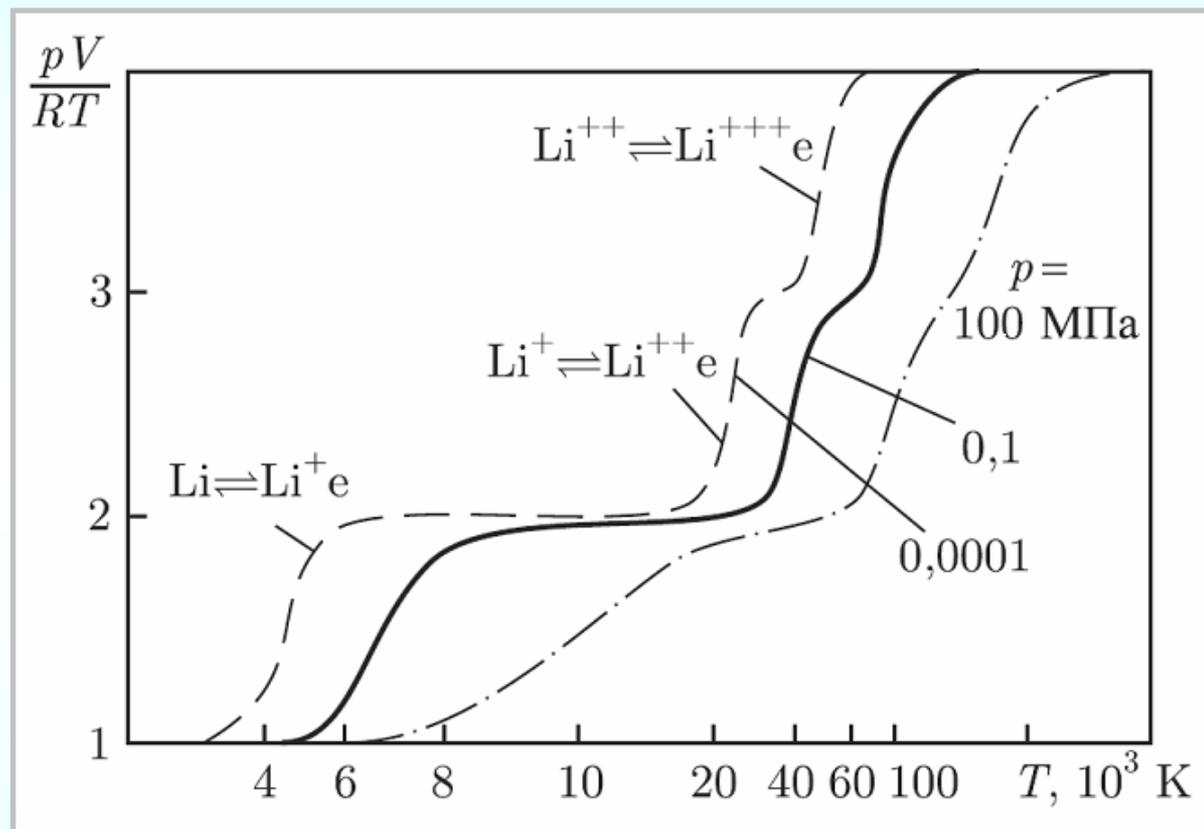
Решение:

Именно химический потенциал является искомым управляющим параметром в вакуумном пределе

*Chemical potential should be taken as the **ruling parameter** in the vacuum limit*

ТЕРМИЧЕСКОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПЛАЗМЫ ЛИТИЯ - $P(\rho, T)$

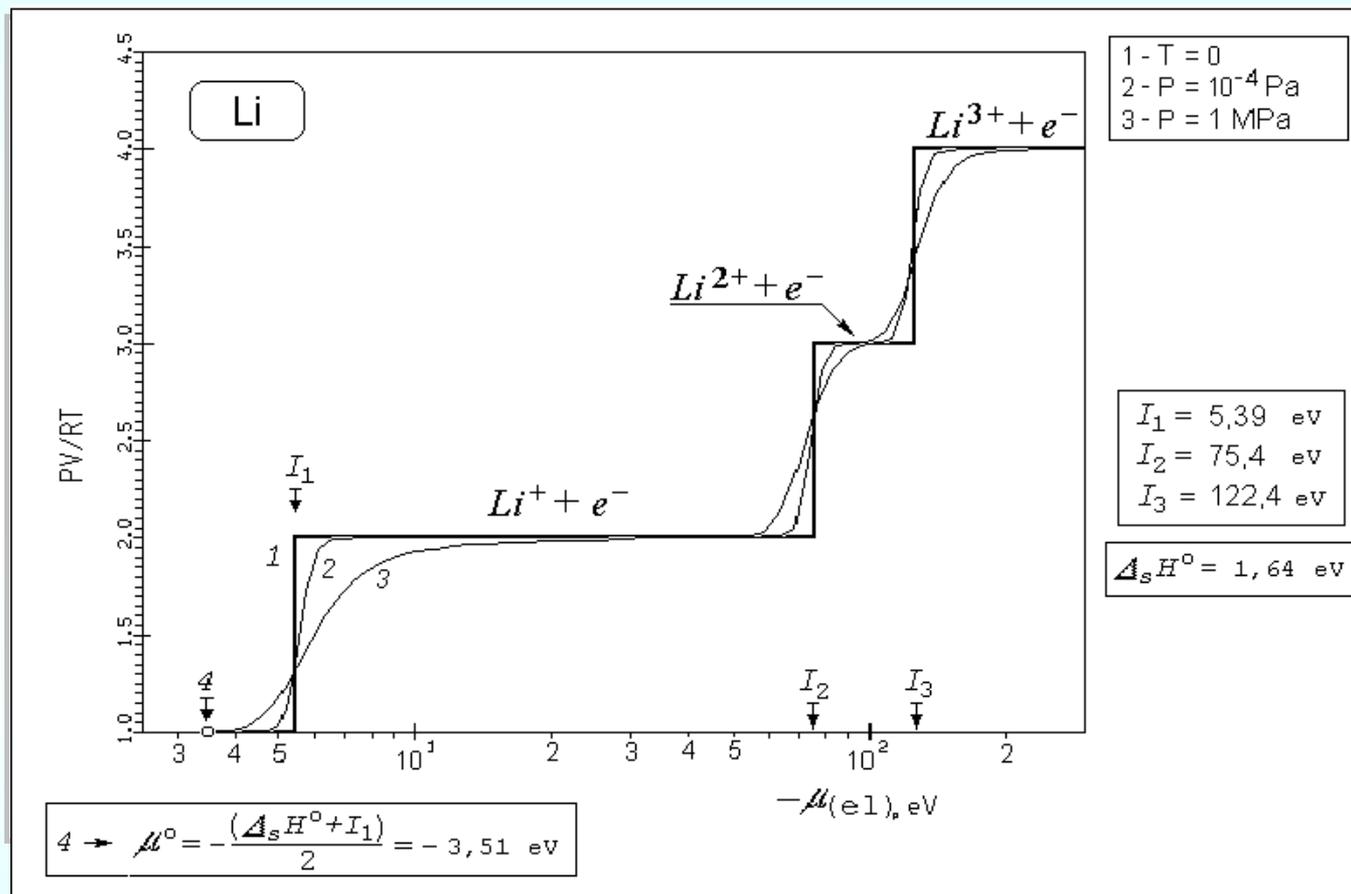
“Полосы” ионизации (на изобарах – 0.001; 1: 1000 бар)



Иосилевский И.Л. - *Энциклопедия НТП*, 2004 (Ред. В.Е. Фортов) / Расчеты - код САНА (В.Грязнов)

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л....Сон Э.Е., Фортов В.Е. // *Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора*, /Под ред. Иевлева В.М., М.: Атомиздат, 1980

“Лестница ионизации” – Термическое уравнение состояния плазмы лития

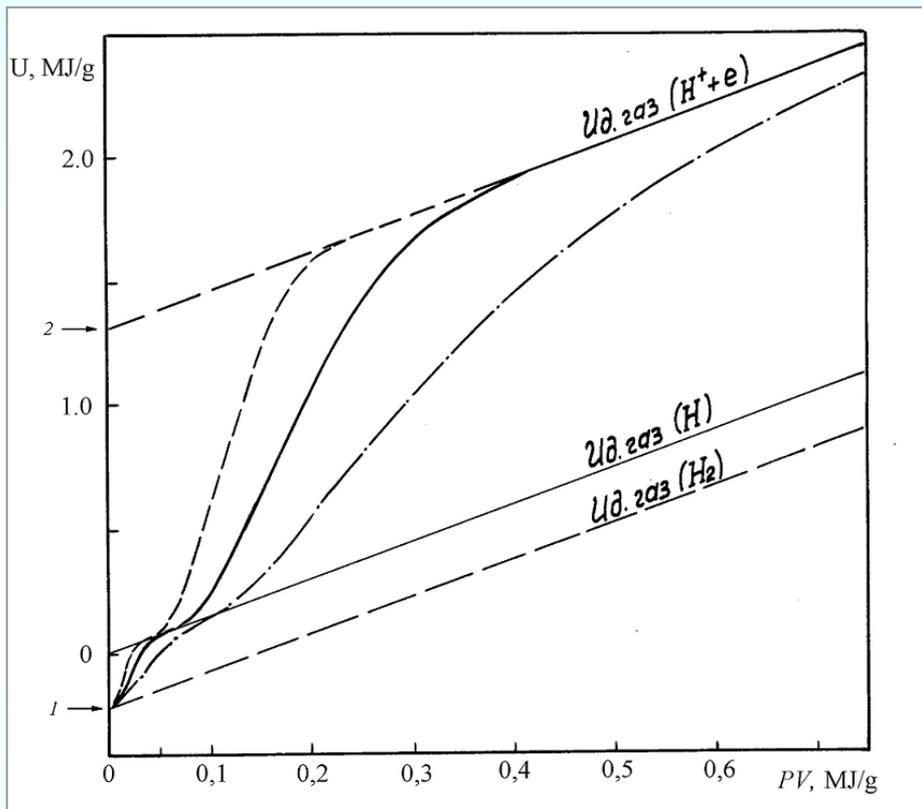


Иосилевский И.Л. - Энциклопедия НТП, 2004 (Ред. В.Е. Фортов) / Расчеты - код САНА (В.Грязнов)

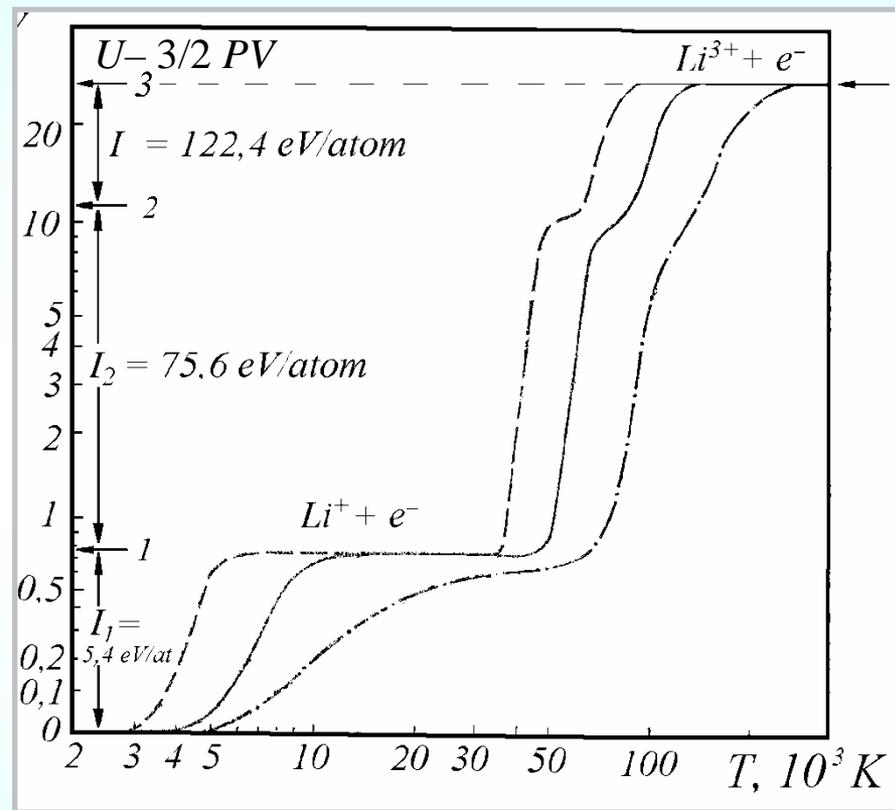
Грязнов В.К., Иосилевский И.Л....Сон Э.Е., Фортов В.Е. // Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора, /Под ред. Иевлева В.М., М.: Атомиздат, 1980

Калорическое уравнение состояния плазмы водорода и лития - $U(\rho, T)$

Полосы ионизации (на изобарах – 0.001; 1: 1000 бар)



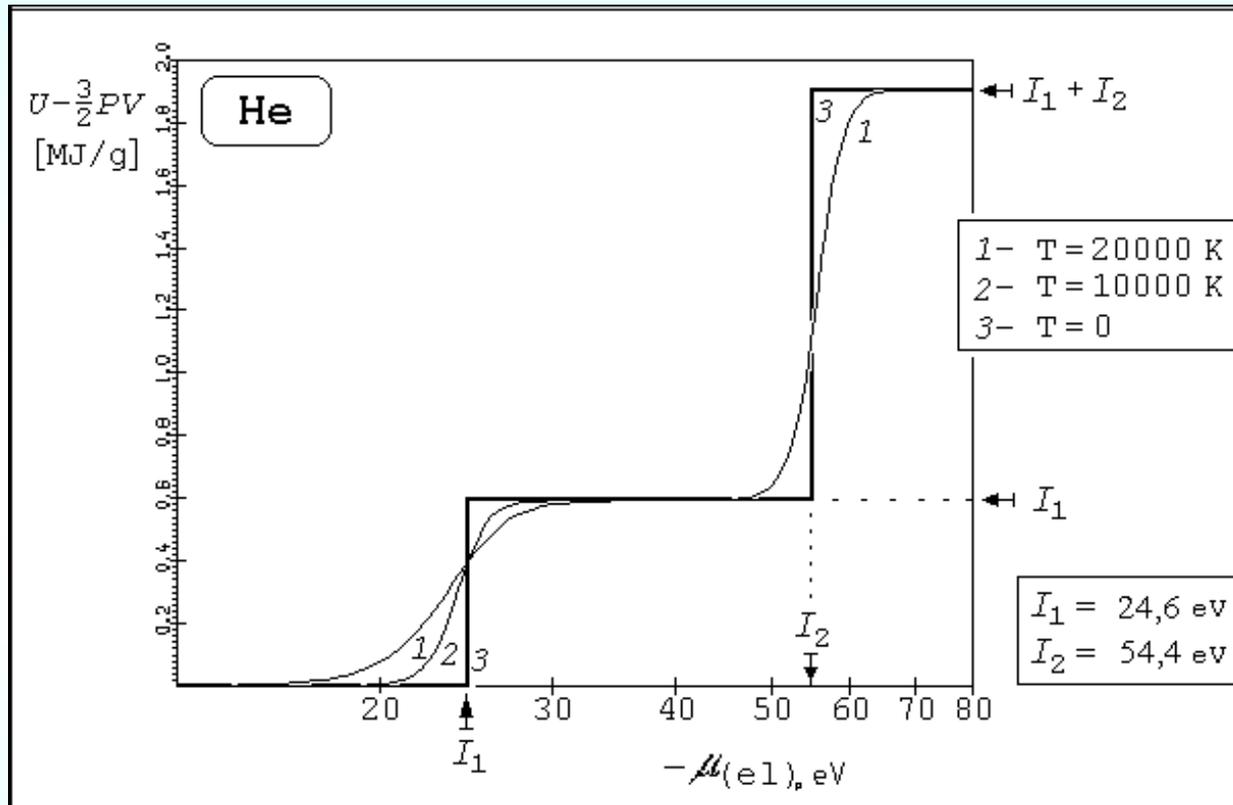
Водород



Литий

“Лестница ионизации” –

Калорическое уравнение состояния плазмы гелия



NB!

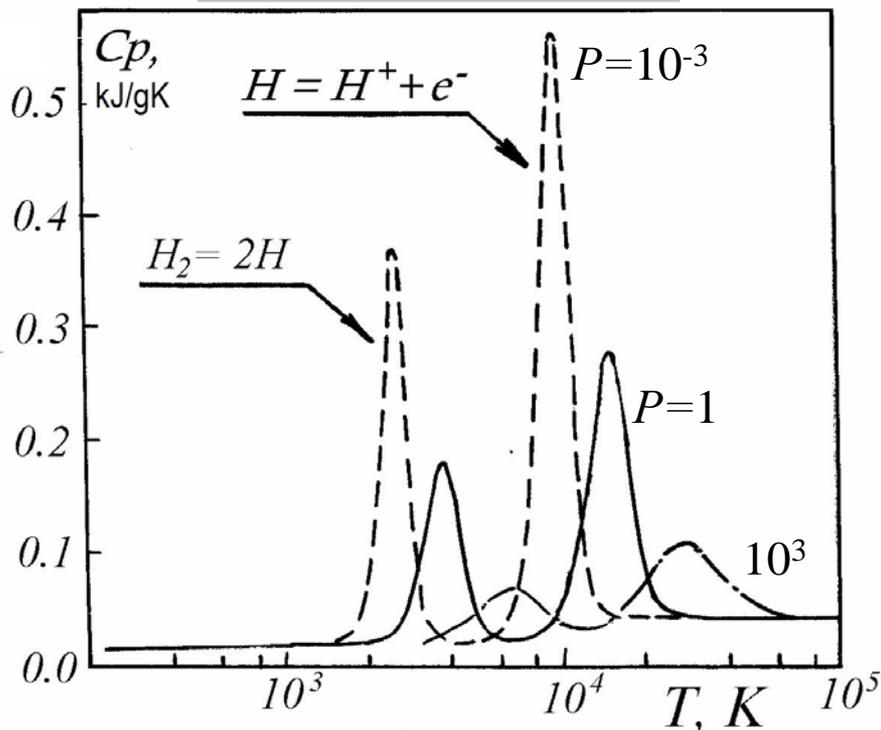
Положение ступенек “Лестницы” - точно соответствует величинам потенциалов ионизации - I_k

Величина ступенек “Лестницы” - точно соответствует величинам потенциалов ионизации - I_k

Дифференциальные термодинамические величины

Теплоемкость газо-плазменного состояния

Плазма водорода



Плазма ксенона

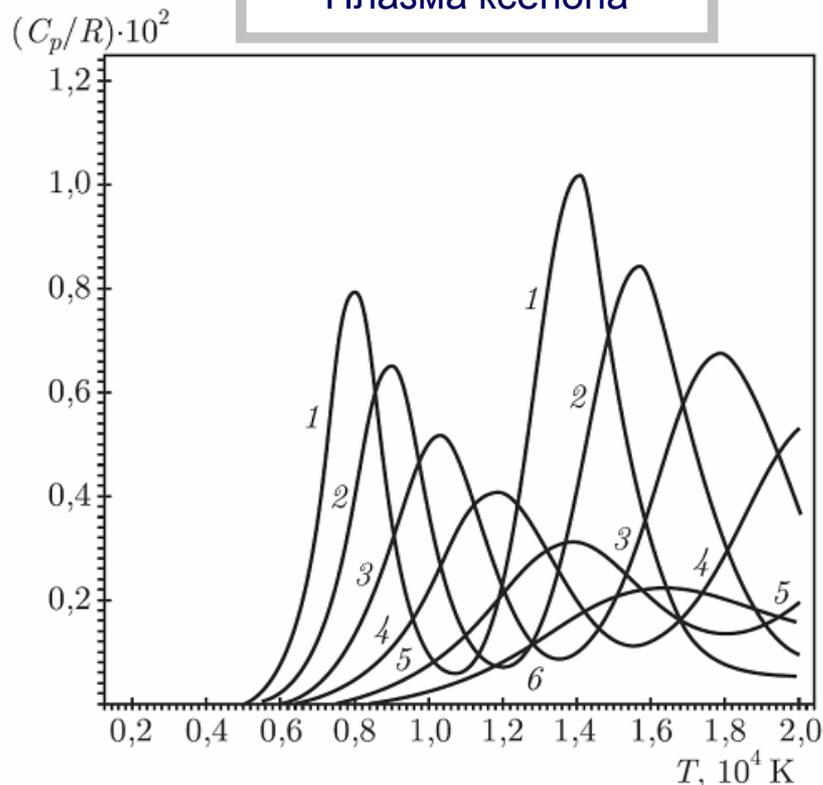


Рис. 6. Изобарическая теплоёмкость C_p плазмы ксенона. По результатам расчёта в приближении слабо-неидеальной плазмы (код «САХА-IV» [26]). Обозначения: 1 — $p = 0,1$ кПа; 2 — 1 кПа; 3 — 10 кПа; 4 — 0,1 МПа; 5 — 1 МПа; 6 — 10 МПа

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. (код САНА)
Энциклопедия НТП (Ред. В.Е.Фортов) 2000

Дифференциальные термодинамические величины

“Термодинамический спектр” вещества

“Спектр излучения”

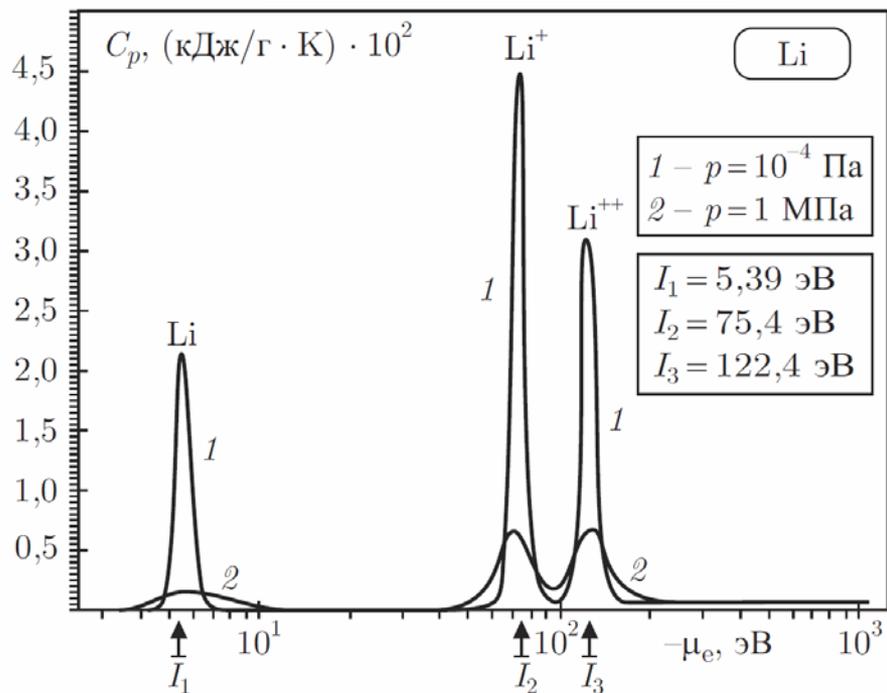


Рис. 14. Изобарическая теплоёмкость плазмы лития как функция химического потенциала электрона (со знаком минус). (рис. из [22] [39]). Обозначения: 1, 2 — изобары; Стрелки — элементы энергетической шкалы лития — потенциалы ионизации: I_1 , I_2 , I_3 . Расчёт в пренебрежении вкладом равновесного излучения

“Спектр поглощения”

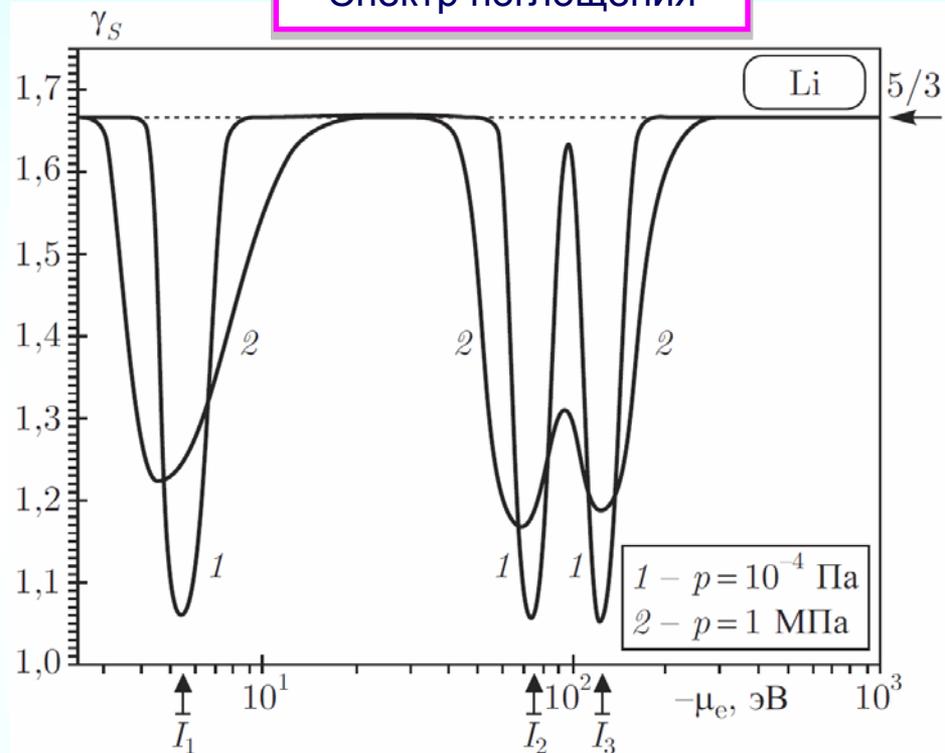


Рис. 15. Эффективный показатель изоэнтропы $\gamma_S \equiv -(\partial \ln p / \partial \ln V)_S$ плазмы лития как функция химического потенциала электрона (со знаком минус). (рис. из [22, 39]). Отмечено идеально-газовое значение: $\gamma_S \equiv 5/3$. Остальные обозначения — как на рис. 14

Итог

Традиционный подход

Асимптотическое разложение “по степеням” активности при **фиксированной температуре – T**

$$\sim f_i(\mu, T) = A_i(T) \cdot \exp\{-\mu/kT\}$$

Нулевым приближением является Идеальный Газ ядер и электронов

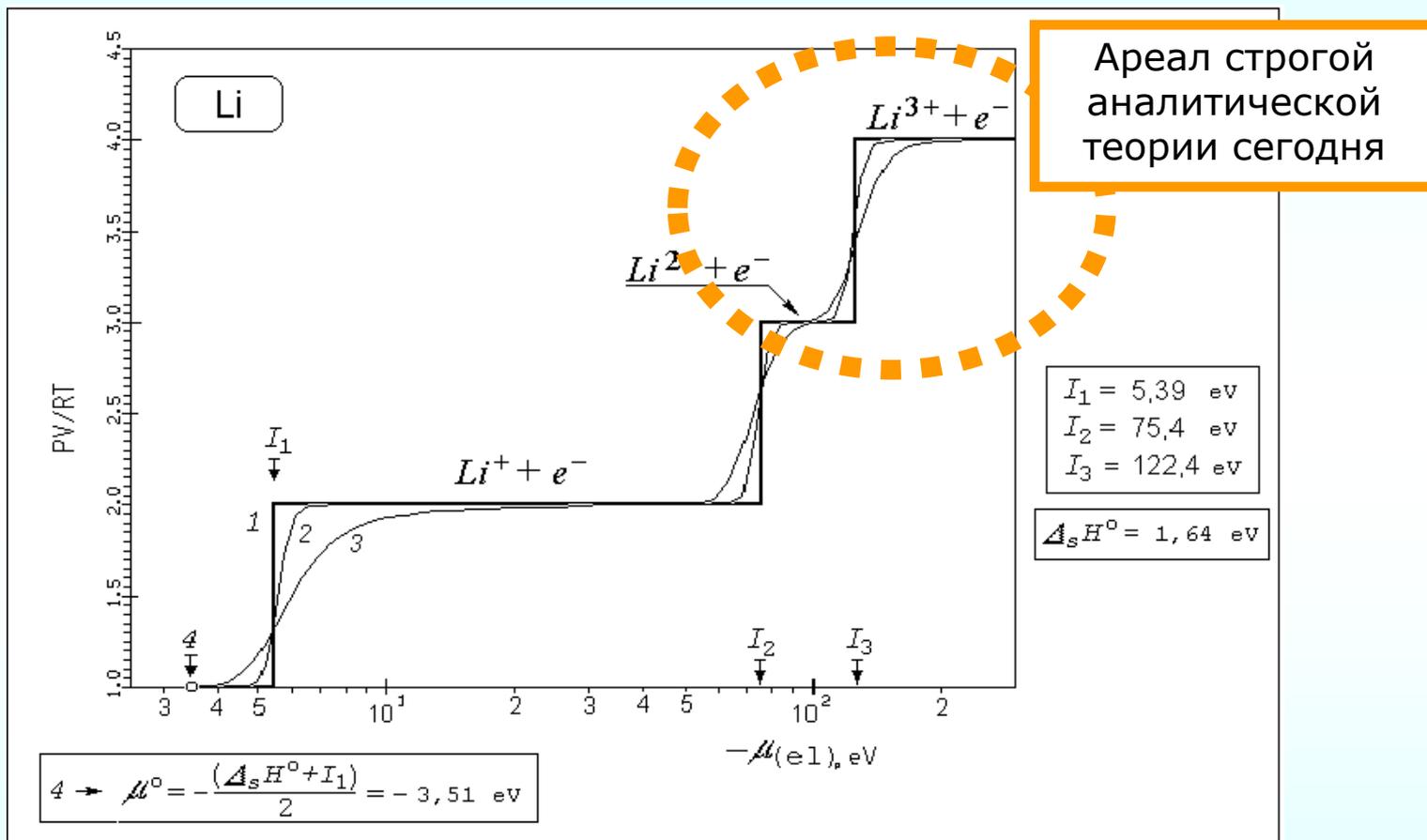
Предлагаемое решение

Асимптотическое разложение (!) при **фиксированном значении $\mu(n, T)$** по асимптотической системе функций от температуры $\sim f_i(\mu, T) = A_i(\mu) \cdot \exp\{-b_i(\mu)/T\}$

При таком подходе **Нулевым приближением является ВСЯ “Лестница ионизации”**
(во всем диапазоне значений химического потенциала !)

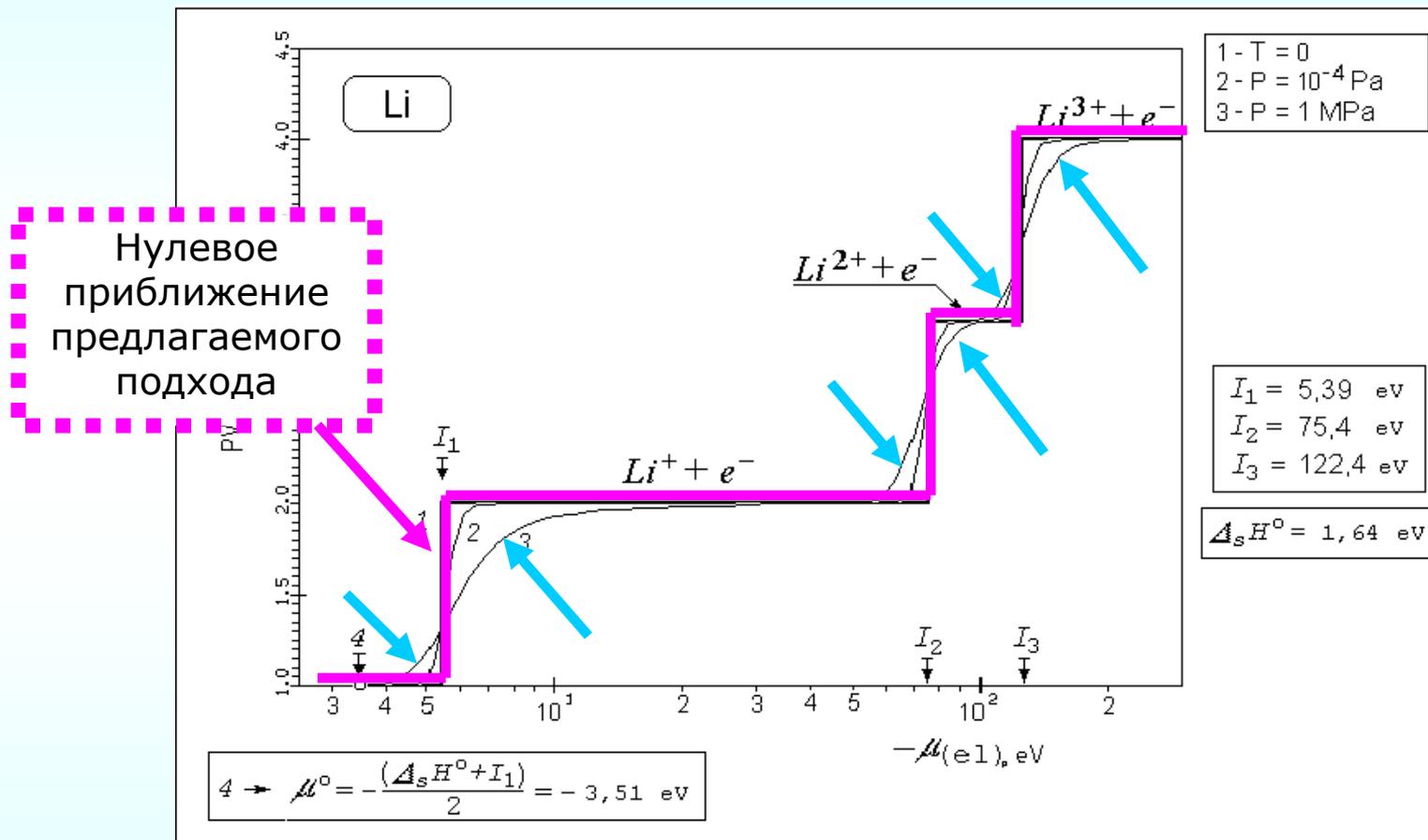
“Лестница ионизации” –

Нулевое приближение при построении строгого описания неидеальной плазмы в химической модели



“Лестница ионизации” –

Нулевое приближение при построении строгого описания неидеальной плазмы в химической модели



$$Y(z, T) = Y_0(\mu) + Y_1(\mu, T) + Y_2(\mu, T) + \dots + Y_k(\mu, T) + \dots + Y_{k+1}(\mu, T) + \dots$$

$$\frac{Y_{i+1}(\mu, T)}{Y_i(\mu, T)} \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow 0; \mu = \text{const})$$

Thank You

*“Не говори с тоской – их нет,
но с благодарностью – были!...”*

