

На правах рукописи

Козлитин  
Иван Алексеевич

**Микрополевая модель квазинезависимых частиц и  
неидеальная плазма**

Специальность 05.13.18 – математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва  
2009

Работа выполнена в Институте математического моделирования РАН

Научный руководитель – доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН  
Калиткин Николай Николаевич

Официальные оппоненты – доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН  
Костомаров Дмитрий Павлович

– кандидат физико-математических наук  
Прончева Надежда Геннадьевна

Ведущая организация – Обнинский государственный технический  
университет атомной энергетики (ИАТЭ)

Защита состоится «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2009 года в  
\_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета Д.002.058.01 при  
институте Институт математического моделирования РАН по адресу: 125047,  
Москва, Миусская пл., 4а.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИММ РАН.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2009г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

Змитренко Н.В.

## Общая характеристика работы

**Актуальность.** Традиционно для описания термодинамических свойств неидеальной плазмы используется модели дебаевского типа. Самой первой такой моделью (и самой первой моделью неидеальности плазмы) была модель Дебая в малом каноническом ансамбле (МДХ, Тиман, 1954). Затем появилась модель Дебая в большом каноническом ансамбле (БДХ, Ликальтер, 1969) и модель однокомпонентной плазмы (ОКП, Hansen, Pollock, 1973). Позднее было предложено ее обобщение на случай многокомпонентной плазмы (МКП, Калиткин, 1983). Существуют и другие дебаевские модели. Их объединяет то, что они переходят в модель МДХ при малых плотностях. При больших плотностях результаты расчета по этим моделям сильно различаются.

Большинство из них (кроме БДХ) предсказывают плазменный фазовый переход, условия возникновения которого отличаются в разных моделях. Экспериментаторы искали такой плазменный фазовый переход, но не обнаружили. Кроме того, в моделях МДХ, МКП и БДХ нарушается электронейтральность среды в целом, а в моделях МДХ и МКП существуют области неединственности решения уравнений ионизационного равновесия [1].

Между тем для расчета спектра плазмы давно и успешно применяются модели плазменного микрополя. В последнее время все больше ученых склоняются к тому, что плазменные микрополя оказывают существенное влияние не только на оптические, но и на термодинамические свойства плазмы. Еще в дискуссиях 70-х годов было установлено, что именно действие микрополя вызывает аномальное уменьшение заселенности возбужденных уровней в слабо неидеальной плазме.

Заметим, что использование плазменного микрополя для описания термодинамики плазмы позволяет описывать оптические и термодинамические свойства плазмы в рамках единой теории.

Первым, кто применил плазменное микрополе к расчету термодинамических свойств плазмы, был Севастьяненко (1980). В его работах микрополе использовалось для обрезания статистических сумм атомов и ионов, но эта работа не имела продолжения. В непротиворечивой (самосогласованной) модели неидеальной плазмы способ обрезания статистических сумм должен быть согласован с поправками на неидеальность плазмы. Этого у Севастьяненко сделано не было.

Первой моделью неидеальности плазмы с микрополевой поправкой на неидеальность была модель Волокитина-Голосного-Калиткина (ВГК, 1994). В ней модель микрополя МАРЕХ (Голосной, 1991) использовалась как для обрезания статистических сумм, так и для построения поправки на неидеальность плазмы. Модель ВГК хорошо описывала число видимых спектральных линий в плотной плазме в экспериментах Гаврилова [2] и Рочестерского университета [3]. В ней не возникало областей отрицательного давления, характерных для моделей МДХ и МКП, свидетельствовавших о наличии фазового перехода. Однако модель ВГК была не вполне самосогласованна. Кроме того, она была неудобна для выполнения массовых расчетов, поскольку поправки к термодинамическим величинам не записывались в явном виде. Для их вычисления требовались весьма громоздкие численные расчеты.

Следующим шагом в развитии микрополевого подхода была модель Калиткина-Павлова (КП, 2005). В ней поправки к термодинамическим функциям записывались в явном виде. Был построен численный алгоритм расчета состава и термодинамики многократно ионизованной плазмы одного элемента по этой модели.

Однако и модель КП не является строго самосогласованной. Поправка на неидеальность и сдвиг потенциалов в этой модели согласуются с помощью аппроксимации с точностью в несколько процентов. Кроме того, статистические суммы обрезаются по величине среднего микрополя без учета формы функции распределения микрополя, что не вполне точно. Более

правильным является непосредственное введение микрополевого формфактора в статистические суммы.

Отметим также, что алгоритм расчета состава плазмы по модели КП иногда заикливался в области однократной ионизации при его применении к плазме большой плотности.

Требовалась доработка не только микролевой модели неидеальности плазмы и алгоритма расчета состава плазмы, но и самой модели микрополя. Дело в том, что традиционные модели микрополя имеют существенный изъян – бесконечную плотность энергии микрополя в предельном случае разреженной плазмы, что абсурдно с физической точки зрения.

**Цель работы** - построение строго самосогласованной микролевой модели неидеальности газовой плазмы и создание программы расчета состава и термодинамических функций плазмы по этой модели. Модель должна быть пригодна для расчета свойств плазмы плотностью от разреженной до твердотельной (до начала ионизации сжатием) в диапазоне температур 1 эВ – 10 КэВ. Программа должна обеспечивать возможность расчета в этой области за приемлемое время.

**Научная новизна.** Создана оригинальная первопринципная модель плазменного микрополя, позволяющая единообразно описывать оптические и термодинамические свойства плазмы. Также впервые удалось построить строго самосогласованную микролевою модель неидеальности плазмы. Предложен усовершенствованный алгоритм расчета состава плазмы, позволяющий вести расчет по модели ионизационного равновесия при существенно больших плотностях и более низких температурах, чем это было возможно ранее.

**Практическая ценность работы.** Создана программа, позволяющая быстро (за несколько секунд на современных персональных компьютерах) рассчитывать подробные таблицы состава и термодинамических функций плазмы одного элемента в огромном диапазоне температур (1 эВ – 10 КэВ), и

концентраций ( $10^{16} - 10^{24} \text{ см}^{-3}$ ). В дальнейшем эта программа будет встроена в базу данных теплофизических свойств веществ ТЕФИС.

**Апробация работы.** Полученные результаты докладывались и обсуждались на конференциях «VIII тематические Харитоновские чтения» (Саров, 2006), «IX тематические Харитоновские чтения» (Саров, 2007), 3rd Moscow Workshop TARGETS & APPLICATIONS (Lebedev Physical Institute, Moscow, October, 2007). Также они докладывались на сессиях РАН по неидеальной плазме в 2005, 2006 и 2007 годах и на семинаре в Институте механики МГУ (май 2007). По материалам диссертации сделан доклад на совместном семинаре Института математического моделирования РАН и кафедры математического моделирования Московского физико-технического института (март 2008).

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации 79 страниц, рисунков 22, таблиц 2. Список литературы включает 45 наименований.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 6 работ. Их список представлен в конце автореферата.

### **Краткое содержание работы.**

**Введение** включает обоснование актуальности темы, содержит формулировку основных целей работы и краткое содержание глав.

**Первая глава** посвящена моделированию плазменного микрополя. Сначала рассматривается классическая модель Хольцмарка (Holtzmark, 1919) и ее уточнения. Обсуждается проблема ошибочности асимптотики распределения Хольцмарка при  $E \rightarrow \infty$ , приводящая к бесконечной плотности энергии микрополя. Далее кратко затронут вопрос моделирования микрополя по методу Монте-Карло (МК) и приводится методика МК-моделирования распределения Хольцмарка на персональном компьютере. Затем рассмотрен

вариант модели Хольцмарка с запретом на бесконечное сближение частиц, в котором вместо распределения Хольцмарка получается распределение Максвелла. Потом дается описание новой первопринципной модели неидеальности QUIP с конечной плотностью энергии микрополя и проводится сравнение различных моделей микрополя.

Хаотическое тепловое движение зарядов в плазме порождает флуктуирующее микроскопическое электрическое поле (микрополе). В модели Хольцмарка частицы плазмы движутся свободно и некоррелированно. Все конфигурации частиц плазмы считаются равновероятными и вносят одинаковый вклад в распределение микрополя.

Плотность распределения модуля микрополя в этой модели дается распределением Хольцмарка

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \beta \int_0^{\infty} \exp(-x^{3/2}) \sin(\beta x) x dx, \quad (1)$$

где  $\beta = E / E_h$  - безразмерная напряженность поля,  $E_h = (8\pi / 25)^{1/3} z_h R^{-2}$  - масштаб хольцмарковского микрополя и

$$z_h = \left( \sum_j x_j |z_j|^{3/2} \right)^{2/3} \quad (2)$$

- хольцмарковский заряд. Здесь  $z_j$  - заряд частиц  $j$ - того сорта, а  $x_j$  - их концентрация. В сумму (2) логично включить и электроны, так как при расчете микрополя необходимо учитывать влияние всех заряженных частиц.

Традиционно считается, что приближение Хольцмарка верно для горячей разреженной плазмы. Это подтверждается оптическими экспериментами по определению спектра такой плазмы. Модель Хольцмарка дает правильную величину полуширины спектральных линий. Это значит, что район максимума микрополя передается в этой модели разумно.

Асимптотическое поведение распределения Хольцмарка при больших напряженностях микрополя неверно, так как большие поля соответствуют близким пролетам частиц, а в этом случае считать движение частиц некоррелированным и пренебрегать их взаимодействием уже нельзя. К

сожалению, оптические эксперименты не позволяют выяснить правильную асимптотику распределения микрополя, так как «хвосту» распределения микрополя соответствуют «крылья» спектральных линий, форму которых определить затруднительно, поскольку они сливаются с непрерывным фоном.

Другой серьезной проблемой модели Хольцмарка является бесконечность плотности энергии. Распределение (1) убывает как  $E^{-5/2}$ , поэтому у него не существует второй начальный момент, соответствующий плотности энергии микрополя. Такой результат абсурден с точки зрения физики и дополнительно свидетельствует о грубой ошибочности асимптотики распределения Хольцмарка.

В модели Хольцмарка частицы плазмы считаются невзаимодействующими. В дальнейшем были созданы модели, которые учитывали взаимодействие частиц плазмы как между собой, так и с пробной частицей, на которой определялась напряженность микрополя.

Одной из последних и наиболее совершенных моделей этого типа является АРЕХ. В ней учитывается взаимодействие частиц плазмы с пробной частицей и, в меньшей степени, взаимодействие частиц плазмы между собой. При этом учитывались не только парные, но и множественные корреляции [4-6].

Общим для всех моделей такого типа будет, очевидно, хольцмарковский предел для случая горячей разреженной плазмы. Поэтому, независимо от используемого способа учета взаимодействия, все рассмотренные модели имеют те же недостатки, что и модель Хольцмарка при применении к такой плазме.

Наиболее точным и надежным способом расчета плазменного микрополя традиционно считается метод Монте-Карло (МК). Теоретические модели плазменного микрополя обычно верифицируются по результатам МК-расчетов. Обычно считается, что физическая точность метода составляет порядка 5-10%. Однако на такую точность можно рассчитывать только в случае, если верны исходные положения, лежащие в основе МК-модели.



МК-моделирование, проведенное на персональном компьютере, подтвердило, что предположения о невзаимодействии частиц и равновероятности конфигураций частиц плазмы приводят к распределению Хольцмарка с его характерным зарядом  $z_h$ . При этом хорошо воспроизводится медленно убывающий «хвост» распределения, приводящий к бесконечной плотности энергии микрополя.

Это типичный результат для МК-моделирования микрополя. Медленно убывающий «хвост» плотности распределения получается из того, что в модели Хольцмарка заряженные частицы считаются точечными. Давно известно, что представление о точечных зарядах при рассмотрении энергии электрического поля одиночного заряда приводит к абсурдным выводам. Здесь имеет место похожая ситуация.

Введение в модель запрета на слишком близкое сближение частиц немедленно приводит к тому, что в результате МК-моделирования вместо распределения Хольцмарка сразу получается распределение Максвелла.

Пусть частицы независимы, а их взаимодействие – пренебрежимо, как это было и в модели Хольцмарка. Каждая компонента микрополя, например  $E_x$ , является суммой декартовых компонент отдельных частиц, порождающих микрополе. Все частицы равноправны и независимы, а их число огромно. Понятно, что плотность энергии микрополя, создаваемого одной частицей, должна быть конечна. Это значит, что конечным будет и второй начальный момент для плотности распределения вероятности модуля микрополя от одной частицы.

Идентичность распределений случайных величин, их независимость и наличие конечного второго начального момента являются **достаточными** условиями для применения ЦПТ. Значит, согласно ЦПТ  $E_x$  будет иметь нормальное распределение, а  $E$  - максвелловское

$$p(E) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} E^2 / E_0^3 \exp(-E^2 / E_0^2), \quad (3)$$

где  $E_0$  - масштаб микрополя.

Плотность энергии микрополя, распределенного по (3), конечна

$$W \equiv \frac{1}{8\pi} \int_0^{\infty} p(E) E^2 dE = \frac{3}{16\pi} E_0^2. \quad (4)$$

Приведенные выше рассуждения справедливы только для разреженной плазмы. Но для сверхплотной плазмы модель простых гармонических осцилляторов (SHO, Mayer, 1947) дает точно такое же распределение. Поэтому можно предположить, что распределение микрополя (3) справедливо для плазмы любой плотности.

Величину  $E_0$  найдем из соображений размерности. Рассмотрим плазму одинаковых зарядов величины  $z$  с температурой  $T$  и средним радиусом ячейки  $R$  (используется атомная система единиц). Из этих параметров можно составить лишь одну величину размерности напряженности электрического поля  $z/R^2$  и одну безразмерную величину  $z^2/RT$ . Поэтому самый общий допустимый вид масштабного множителя есть

$$E_0 = \frac{z}{R^2} f(\Gamma), \quad \Gamma = \frac{z^2}{RT}. \quad (5)$$

Здесь  $\Gamma$  - обычный параметр неидеальности, а  $f(\Gamma)$  - произвольная функция этого параметра. Надо определить вид этой функции.

Для разреженной плазмы  $\Gamma \rightarrow 0$ . Частицы при этом независимы, а их распределение однородно. Известно, что в этом случае энергия взаимодействия зарядов в расчете на одну атомную ячейку с хорошей точностью равна  $-0.9z^2/R$  (разумеется, она меньше кинетической энергии  $1.5T$ ). Сделаем естественное предположение, что именно эта энергия перешла в энергию поля, и приравняем ее (4), умноженной на объем сферической атомной ячейки. Получим

$$f(0) = (18/5)^{1/2} \approx 1.90. \quad (6)$$

Для сверхплотной плазмы  $\Gamma \rightarrow \infty$ . Потребуем при этом перехода распределения (3), (5) в модель SHO. В модели SHO возьмем пробный заряд  $z_0 = z$ . Это дает

$$f(\Gamma) = (2/\Gamma)^{1/2} \text{ при } \Gamma \rightarrow \infty. \quad (7)$$

Построим простейшую интерполяцию между (6) и (7):

$$f(\Gamma) = (18/(5 + 9\Gamma))^{1/2}. \quad (8)$$

Асимптотики при  $\Gamma \rightarrow 0$  и  $\Gamma \rightarrow \infty$  довольно близки, поэтому и неопределенность в способах интерполяции не превышает 10-15%. Тем самым (3), (5) и (8) является хорошей моделью в огромном диапазоне температур и плотностей. Заметим, что в плазменных экспериментах температура и плотность измеряются не слишком точно. С учетом этого предложенная формула описывает оптические эксперименты не хуже всех предшествующих моделей.

Пусть плазма является смесью зарядов  $z_k$  с относительными концентрациями  $x_k$ . В этом случае необходимо использовать общий вид энергии взаимодействия

$$\Delta E = -\frac{9}{10R} x_e^{1/3} \sum_j x_j z_j^{5/3} = -\frac{9}{10R} z_{eff}^2, \quad (9)$$

где  $x_e = \sum_j x_j z_j$  - электронная концентрация и

$$z_{eff} = x_e^{1/6} \left( \sum_j x_j z_j^{5/3} \right)^{1/2} \quad (10)$$

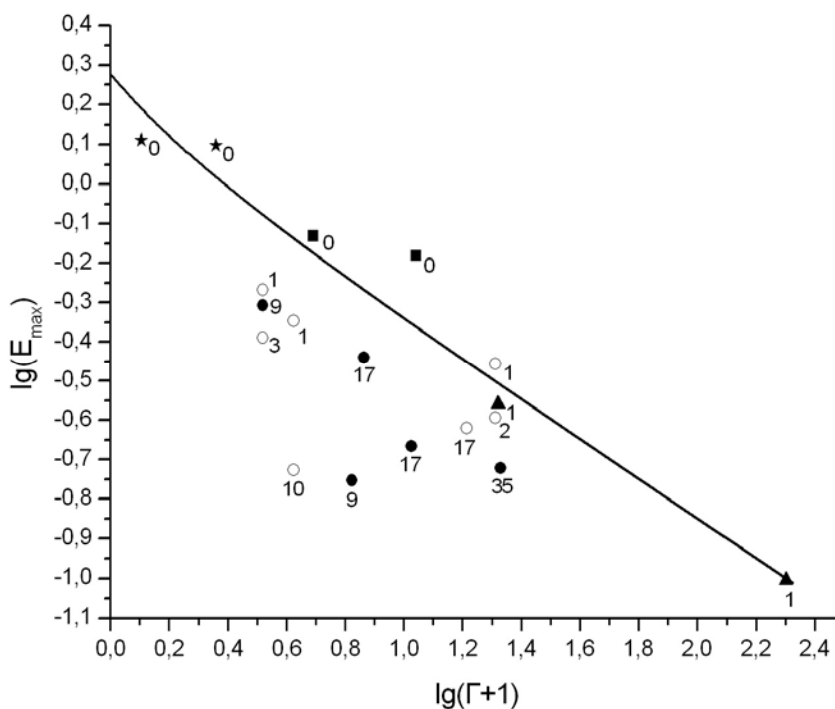
- эффективный заряд. Такая форма эффективного заряда довольно неудобна. Оказывается, хольцмарковский заряд  $z_h$  неплохо аппроксимирует (10). Поэтому в нашей модели мы берем  $z_{eff} = z_h$ .

Описанная модель микрополя с максвелловским распределением модуля микрополя (3), масштабом  $E_0$ , задаваемом формулами (5), (8) и хольцмарковским эффективным зарядом  $z_h$  получила название модели квазинезависимых частиц QUIP (QUasi Independent Particles). Она применима для газовой плазмы любой неидеальности.

Было проведено сравнение новой модели микрополя QUIP с традиционными моделями и расчетами по МК. На рис. 1 в двойном логарифмическом масштабе показана зависимость положения максимума  $E_{max}$  распределения  $p(E)$  от параметра неидеальности в огромном диапазоне

$0 \leq \Gamma \leq 200$ . Маркерами показаны расчеты как по моделям типа АРЕХ и его модификаций, так и расчеты методом МК. Традиционные модели характеризуются большим разбросом: работы разных авторов, разных методов и даже разных лет отстоят друг от друга в разы. При этом их авторы избегают сравнения с другими авторами и с собственными работами других лет. Это показывает, что традиционным моделям доверять нельзя.

**Во второй главе** рассматривается вопрос согласования способа обрезания статистических сумм и поправки на неидеальность плазмы. Дан краткий обзор существующих методов обрезания статистических сумм и предложен новый способ обрезания плазменным микрополем.



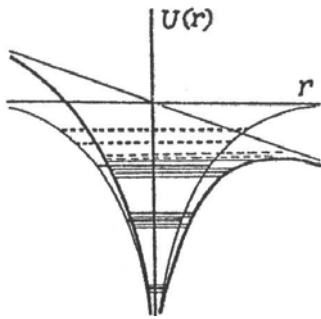
**Рис. 1** Зависимость положения максимума  $E_{\max}$  распределения  $p(E)$  от  $\Gamma$ . Линия – модель QUIP. Звездочки – расчеты по МК[7], пустые кружочки – точки МК[4], квадраты – точки МК[5], закрашенные кружочки – точки МК[6], треугольники – точки SHO. Около маркеров указаны значения пробного заряда  $z_0$ .

Статистическую сумму атома или иона в плазме можно записать следующим образом (все величины и формулы даются в атомной системе единиц):

$$G = \sum_{n=0}^{\infty} g_n^*, \quad g_n^* = g_n \exp(-\varepsilon_n / T) \omega_n. \quad (11)$$

Здесь  $g_n$  - статистические веса уровней,  $\varepsilon_n$  - энергии возбуждения, отсчитанные от основного состояния ( $\varepsilon_0 = 0$ ,  $0 \leq \varepsilon_n < \varphi$ , где  $\varphi$  - потенциал очередной ионизации),  $\omega_n < 1$  - формфакторы, обусловленные взаимодействием частиц и уменьшающие заселенность уровней.

Если атом или ион окружен другими частицами, то это приводит к ограничению статистических сумм, которое математически описывается введением формфактора  $\omega_n$ .



Рассмотрим ион кратности  $z-1$  (для нейтрального атома  $z=1$ ). У него оторван  $z-1$  электрон. Тогда наружный электрон ионного остова находится в поле заряда  $z$  и одновременно в плазменном микрополе напряженности  $E$ . Для высоковозбужденных ридберговских уровней поле ионного остова можно

считать кулоновским. Поэтому суммарный потенциал будет

$$U = -\frac{z}{r} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{r}. \quad (12)$$

где  $\mathbf{r}$  - радиус-вектор электрона. Этот потенциал имеет седловую точку глубиной (см. рис. выше)

$$u^* = -2(zE)^{1/2}. \quad (13)$$

Ясно, что в статистической сумме данного иона следует оставить только уровни, лежащие ниже значения  $u^*$ , то есть удовлетворяющие условию

$$\varphi - \varepsilon_n \geq |u^*|, \quad (14)$$

где  $\varphi$  - потенциал  $z$ -овой ионизации.

Из (13), (14) следует, что для исчезновения  $n$ -ного уровня с энергией возбуждения  $\varepsilon_n$  необходимо поле  $E$ , превышающее некоторый критический уровень  $E_n$  (которое зависит от  $z$  и  $\varepsilon_n$ ):

$$E > E_n = \frac{(\varphi - \varepsilon_n)^2}{4z}. \quad (15)$$

Эта формула строга лишь для ридберговских уровней, поскольку рассчитана в предположении кулоновского характера внутреннего иона. Однако фактически ей можно пользоваться и для нижележащих состояний.

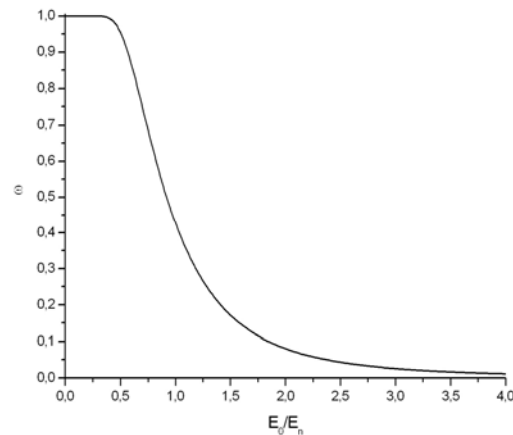
Формфактор  $\omega_n$  является вероятностью сохранения уровня и равен

$$\omega_n = \int_0^{E_n} p(E) dE. \quad (16)$$

В модели QUIP он точно вычисляется

$$\omega(E_n) = \operatorname{erf}(E_n / E_0) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} E_n / E_0 \exp(-E_n^2 / E_0^2), \quad \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt. \quad (17)$$

На рис.2 дан график формфактора для модели QUIP.



**Рис. 2** Формфактор для микрополевой модели QUIP.

В разреженной плазме наблюдается большое число узких спектральных линий. В плотной плазме число линий невелико, а их ширины значительны. При этом лучше выявляются различия моделей.

Рассмотрим эксперимент, поставленный в Рочестерском университете [3] - плазма с  $T = 1100 \text{ эВ}$  и  $\rho = 0,5 \text{ г/см}^3$ , полученная при лазерном нагреве мишени. Расчетная заселенность уровней для такой плазмы показана на рис. 3. Жирные линии – данная микрополевая модель, тонкие сплошные – модель дебаевского типа, штрихи – модель Планка-Ларкина, пунктир – квазиклассическая модель. Черными кружками обозначены уровни, переход с которых наблюдается в экспериментах, а светлыми кружками –

ненаблюдаемые уровни. Предельно наблюдаемая заселенность изображена заштрихованным коридором. Микрополевая модель предсказывает 3 интенсивные линии, слабую 4 и практически невидимую 5, что хорошо согласуется с экспериментом. Модели дебаевского типа и квазиклассическая модель предсказывают гораздо больше линий, причем очень ярких. Модель Планка-Ларкина предсказывает меньше линий, чем видно в экспериментах. Таким образом, только микрополевая модель верно предсказывает число наблюдаемых спектральных линий.

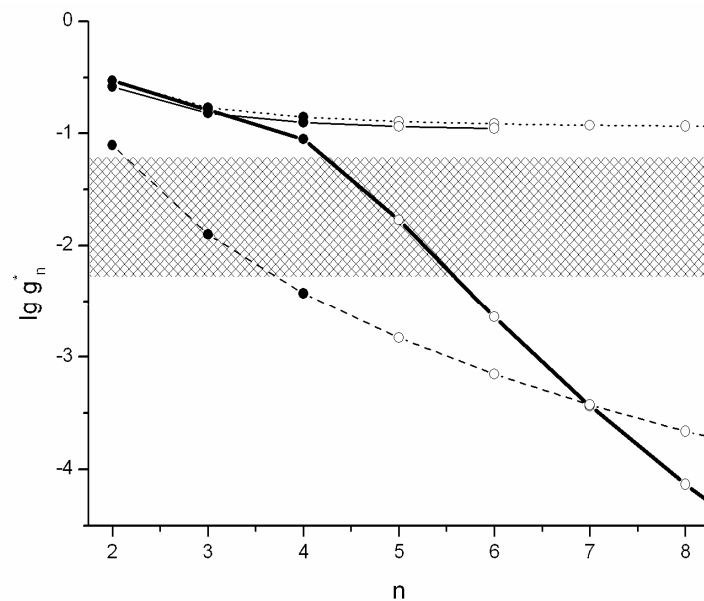


Рис. 3 Заселенности  $g_n^*$  уровней  $Ar^{+16}$  с главным квантовым числом  $n$ .

В третьей главе подробно описывается метод расчета состава и термодинамики плазмы по модели ионизационного равновесия без конкретизации вида поправок на неидеальность плазмы. Предложено усовершенствование алгоритма расчета состава плазмы.

Рассмотрим плазму, состоящую из ионов различной кратности и свободных электронов, находящуюся в локальном термодинамическом равновесии. Пусть плазма образовалась из смеси  $i$  - х элементов, относительные концентрации которых по числу атомов равны  $x_i$ . При нагревании появляются  $k$  - кратные ионы  $i$  - х элементов и электроны с концентрациями  $x_{ik}$  и  $x_e$  (значение  $k=0$  соответствует нейтральным атомам). Эти концентрации должны удовлетворять балансным соотношениям

$$\sum_{k=0}^{z_i} x_{ik} = x_i, \quad \sum_i x_i = 1, \quad \sum_i \sum_{k=0}^{z_{ik}} kx_{ik} = x_e, \quad (18)$$

где  $z_i$  - атомные номера элементов.

Среднюю свободную энергию, приходящуюся на одну атомную ячейку, представим в следующем виде [8]:

$$F = F_e + \sum_i \sum_{k=0}^{z_i} x_{ik} F_{ik} + \Delta F. \quad (19)$$

Здесь  $F_e$  - свободная энергия электронного газа,  $F_{ik}$  - энергии разных сортов ионов, и  $\Delta F$  - поправка на взаимодействие.

Состояние равновесия соответствует минимуму свободной энергии (19) по всем концентрациям при условии соблюдения балансных соотношений (18). В результате минимизации получим следующее обобщение уравнений Саха:

$$\mu + T \ln \left( \frac{G_{i,k-1} x_{ik}}{G_{ik} x_{i,k-1}} \right) + \varphi_{ik} + \Delta \varphi_{ik} + \delta \varphi_{ik} = 0, \quad 1 \leq k \leq z_i, \quad 1 \leq i \leq J, \quad (20)$$

$$x_e = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} t^{3/2} V I_{1/2} \left( \frac{\mu}{t} \right), \quad (21)$$

$$\Delta \varphi_{ik} = \left( \frac{\partial}{\partial x_{ik}} - \frac{\partial}{\partial x_{i,k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e} \right) \Delta F, \quad (22)$$

$$\delta \varphi_{ik} = -T \sum_{j=1}^J \sum_{q=0}^{z_j} x_{jq} \left( \frac{\partial}{\partial x_{ik}} - \frac{\partial}{\partial x_{i,k-1}} + \frac{\partial}{\partial x_e} \right) \ln G_{jq}. \quad (23)$$

Здесь  $\mu$  - химический потенциал,  $T$  - ионная температура,  $t$  - электронная температура,  $G_{ik}$  - статистические суммы атомов и ионов,  $\varphi_{ik}$  - потенциалы  $k$  - кратной ионизации  $i$  - того сорта частиц,  $\Delta \varphi_{ik}$  - снижение потенциалов ионизации, вызванное взаимодействием частиц,  $\delta \varphi_{ik}$  - дополнительные сдвиги потенциалов ионизации, вызванные обрезанием статистических сумм,  $J$  - число элементов в плазменной смеси.

Алгоритм создан и реализован для случая многократно ионизованной плазмы одного элемента. Нетрудно обобщить его на случай плазмы сложного состава.



Статистические суммы рассчитываются по основному состоянию атома или иона

$$G_k = g_k \omega_k. \quad (24)$$

Здесь  $g_k$  - статистический вес основного состояния, а  $\omega_k$  - микрополевой формфактор.

Система обобщенных уравнений Саха сводится к одному уравнению относительно электронной концентрации

$$x_e = \sum_{p=1}^n \left( p \exp \left( \sum_{m=1}^p f_m^*(x_e) \right) \right) \left( \sum_{p=1}^n \exp \left( \sum_{m=1}^p f_m^*(x_e) \right) \right)^{-1}. \quad (25)$$

Здесь  $f_k^*(x_e) = \ln G_k - \ln G_{k-1} - \frac{t}{T} \tilde{I}_{1/2} \left( \frac{\pi^2 x_e}{\sqrt{2} t^{3/2} V} \right) - (\varphi_k + \Delta\varphi_k + \delta\varphi_k) / T$  и  $\tilde{I}_{1/2}$  - функция обратная к функции Ферми-Дирака  $I_{1/2}$ . Значения  $x_k$  вычисляются по формулам

$$x_0 = \left[ \sum_{p=1}^n \exp \left( \sum_{m=1}^p f_m^*(x_e) \right) \right]^{-1}, \quad x_k = x_0 \exp \left( \sum_{m=1}^k f_m^*(x_e) \right), \quad 1 \leq k \leq n. \quad (26)$$

Уравнение (25) легко решается в случае, если ионизация плазмы не превышает однократной. Тогда по электронной концентрации легко получить концентрацию нейтральных частиц  $x_0 = 1 - x_e$  и однократно ионизованных атомов  $x_1 = x_e$ . Для многократно ионизованной плазмы приходится использовать итерационный процесс, одна итерация которого представляет из себя решение уравнения (25) при фиксированном векторе концентраций  $x_0, x_1, \dots, x_n$  с последующим пересчетом этого вектора по формулам (26). Итерации заканчиваются, когда разность значений  $x_e$ , полученных с двух последних итераций, становится по модулю меньше некоторого  $\delta$ .

Описанный процесс хорошо сходится для плазмы не слишком большой плотности, но иногда закикливается для плотной не слишком горячей плазмы в области однократной ионизации. Для борьбы с закикливанием был предложен гибридный алгоритм, объединяющий достоинства алгоритмов для случаев однократной и многократной ионизации.

Суть усовершенствования состоит в том, что вектор концентраций ионов не остается неизменным в ходе решения уравнения (25), как это было раньше, а пересчитывается с помощью балансных соотношений по текущему значению  $x_e$

$$x'_i = x_i x_e \left( \sum_{m=1}^n m x_m \right)^{-1}, \quad 1 \leq i \leq n, \quad x'_0 = 1 - \sum_{m=1}^n x'_m. \quad (27)$$

Здесь  $x_1, x_2, \dots, x_n$  - вектор концентраций на входе в процедуру решения уравнения (25).

Поскольку итерации гибридного алгоритма требуют значительно больших вычислительных затрат, то для уменьшения времени расчета их стоит начинать только в том случае, если достаточно большое количество итераций исходного алгоритма не дало результата (в нашей программе они начинались после 10 итераций исходного алгоритма).

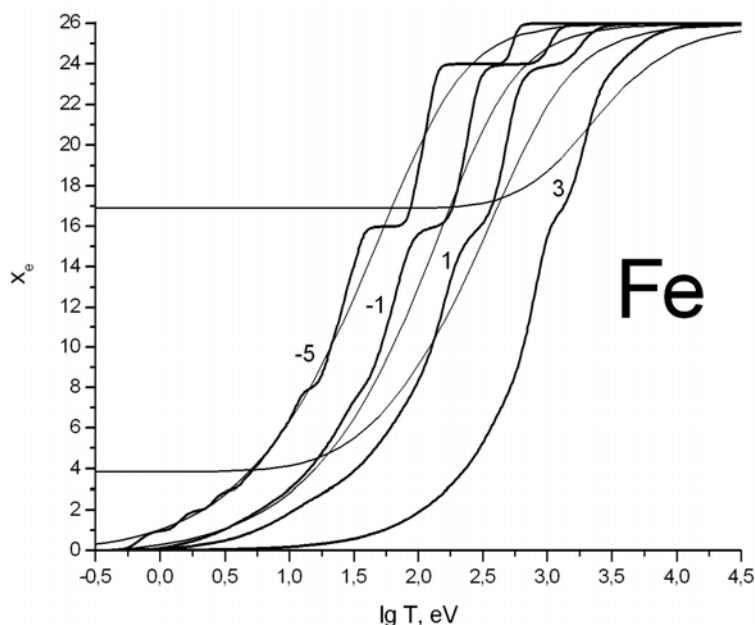
Описанная модификация алгоритма расчета состава плазмы позволила вести расчет при существенно большей плотности и при более низкой температуре плазмы.

Пример расчета степени ионизации  $x_e$  плазмы Fe по модели QUIP дан на рис. 4. Плотность и температура плазмы меняются в огромных пределах - от  $10^{-5}$  г/см<sup>3</sup> до  $10^3$  г/см<sup>3</sup> и от 0.3 эВ до 30 КэВ соответственно. Конечно, при низких температурах и плотности в  $10^3$  г/см<sup>3</sup> использовать модель ионизационного равновесия уже нельзя, но сама возможность проведения расчета в таких условиях доказывает надежность предложенного алгоритма расчета состава плазмы.

Модель QUIP предсказывает ступенчатую ионизацию (толстые линии на рис. 4). При росте температуры электроны атома последовательно ионизируются. В пределах одной оболочки потенциалы ионизации отличаются незначительно, и поэтому кривая идет гладко. При переходе к следующей оболочке, потенциал ионизации увеличивается с большим скачком. Поэтому на кривой ионизации появляется длинная ступенька. Для разреженной плазмы при низкой температуре также можно заметить

ступеньки при ионизации в пределах одной оболочки. С ростом плотности плазмы оболочечные эффекты уменьшаются. Это связано с возрастанием концентраций ионов соседних кратностей.

Тонкие линии на рис. 4 соответствует модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками (ТФП, Киржниц, 1957). В этой модели не учитывается оболочечная структура атома. Поэтому она дает плавную кривую ионизации без ступенек. Модели ТФП и QUIP хорошо согласуются для разреженной плазмы, удовлетворительно для умеренно плотной (до  $10^{-1}$  г/см<sup>3</sup>). Далее кривые существенно расходятся, но в этой области уже неприменима модель ионизационного равновесия (возникает ионизация сжатием).



**Рис. 4** Зависимости степени ионизации от логарифма температуры для плазмы Fe. Слева от кривых указан десятичный логарифм плотности плазмы в г/см<sup>3</sup>. Толстые линии – модель QUIP, тонкие – модель ТФП.

Термодинамика плазмы рассчитывалась обычным способом [8].

**В четвертой главе** строится новая самосогласованная модель неидеальной плазмы на основе микрополевой модели QUIP: выводятся поправки на неидеальность ко всем термодинамическим функциям и сдвиг потенциала ионизации. Дан обзор традиционных и микрополевых моделей неидеальности.

В модели QUIP энергия микрополя вычисляется следующим образом:

$$E_{mf} = \frac{z_h^2}{R} \left( \frac{10}{9} + 2 \frac{z_h^2}{RT} \right)^{-1}. \quad (28)$$

Мы считаем, что энергия взаимодействия зарядов в плазме и есть энергия микрополя. Поэтому поправка на неидеальность к энергии плазмы будет равна энергии микрополя (28) взятой с обратным знаком

$$\Delta E = -E_{mf} = -\frac{9}{10} \Gamma T \left( 1 + \frac{9}{5} \Gamma \right)^{-1}. \quad (29)$$

Поправка к свободной энергии  $\Delta F$  получается интегрированием (29)

$$\Delta F = -\frac{T}{2} \ln \left( 1 + \frac{9}{5} \Gamma \right), \quad \Gamma = \frac{z_h^2}{RT} \quad (30)$$

Дифференцируя (30) нетрудно получить поправки к термодинамическим функциям и выражение для сдвига потенциала

$$\Delta P = -\frac{\partial \Delta F}{\Delta V} = -\frac{3}{10} \frac{\Gamma T}{V} \left( 1 + \frac{9}{5} \Gamma \right)^{-1}, \quad (31)$$

$$\Delta S = -\frac{9}{10} \Gamma \left( 1 + \frac{9}{5} \Gamma \right)^{-1} + \frac{1}{2} \ln \left( 1 + \frac{9}{5} \Gamma \right),$$

$$\Delta \varphi_k = -\frac{6}{5R} z_h^{1/2} \left( k^{3/2} - (k-1)^{3/2} + 1 \right) \frac{5}{5+9\Gamma}. \quad (32)$$

Кроме основных поправок, перечисленных выше, мы вводим дополнительные поправки, связанные с обрезанием статистических сумм

$$\delta P = \frac{20+27\Gamma}{30+54\Gamma} \frac{C}{V}, \quad \delta E = -\frac{3\Gamma}{10+18\Gamma} C, \quad (33)$$

$$\delta S = \frac{1}{T} \delta E, \quad \delta \varphi_k = \frac{10}{15+27\Gamma} \frac{k^{3/2} - (k-1)^{3/2} + 1}{z_h^{3/2}} C,$$

$$C = T \sum_m x_m \frac{E_{m+1}}{E_0} \frac{\omega'(E_{m+1}/E_0)}{\omega(E_{m+1}/E_0)}, \quad E_{m+1} = \varphi_{m+1}^2 / 4z.$$

где  $\omega$  - микрополевой формфактор (17), а  $\omega' = p(x)$  - его производная (3).

Эти поправки вносят небольшой вклад в конечный результат и обычно гораздо меньше, чем (31), (32). Совокупные поправки получаются суммированием (31), (32) и (33).

На рис.5 дано сравнение различных моделей неидеальности плазмы по величине давления. Жирные линии – изобары нулевого давления для моделей

МДХ (сплошная линия), ОЭГ (одноэлектронный газ, обозначена частыми штрихами), МКП (редкие штрихи). Тонкой штриховой линией обозначена модель БДХ, тонкой сплошной – модель QUIP. На графике видно, что модель QUIP в области разреженной и умеренно плотной плазмы близка к БДХ, а в области плотной плазмы дает большую неидеальность, чем БДХ, но меньшую, чем другие модели.

Можно показать, что в модели QUIP не может быть отрицательного давления и энергии (как и в БДХ). В традиционных моделях имеются области отрицательного давления. При увеличении плотности плазмы сперва отрицательное давление возникает в модели МДХ, затем в ОЭГ, а потом и в МКП.

Складывается впечатление, что истинная неидеальность (т.е. отличие от модели идеальной плазмы) невелика. Сильнее всего неидеальность влияет на степень ионизации. Отрицательный сдвиг потенциалов, возникающий в большинстве разумных моделей, приводит к увеличению степени ионизации. На давлении и энергии неидеальность сказывается значительно меньше: подскок ионизации компенсируется отрицательными поправками на неидеальность. В результате в модели БДХ давление и энергия мало отличаются от идеальноплазменных. В других моделях неидеальность больше, но более точные модели дают меньшую неидеальность (сравните МДХ и МКП). Поведение микрополевой модели QUIP близко к БДХ – неидеальность получается небольшая.

Дадим практические рекомендации. Для расчетов термодинамики плазмы целесообразно использовать лишь микрополевую модель и модель БДХ. Они дают близкие результаты и термодинамические эксперименты не позволяют сделать выбор между ними. Все прочие модели представляются неадекватными, противоречащими термодинамическим экспериментам. Однако оптические эксперименты показывают, что модель БДХ неправильно описывает заселенность уровней, а микрополевая модель – правильно. Поэтому микрополевую модель неидеальности можно считать наилучшей.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

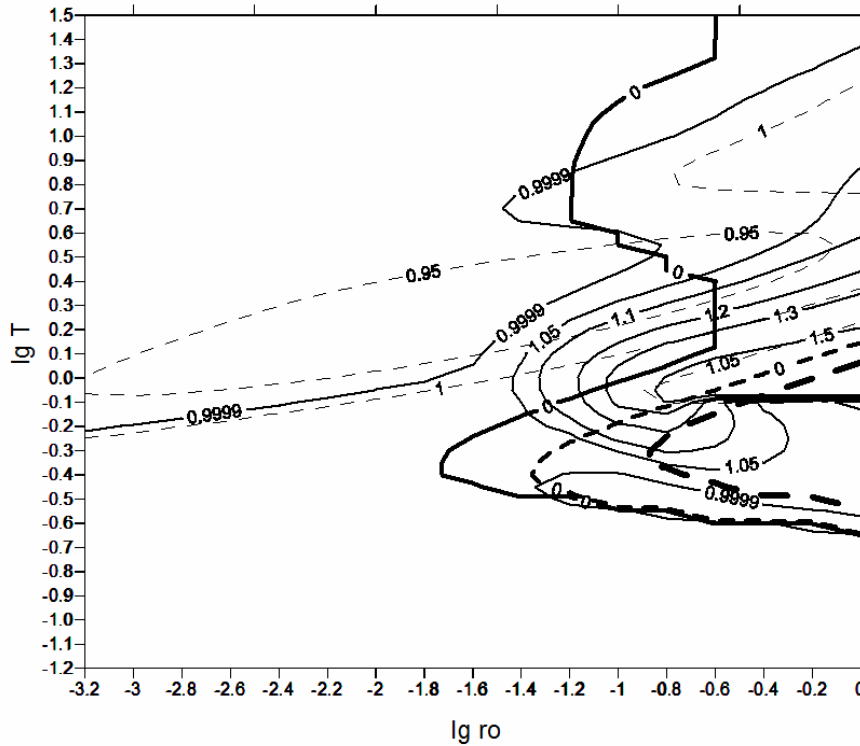


Рис. 5 Изолинии отношения давления, рассчитанного по разным моделям, к давлению идеальной плазмы для плазмы Cs. На кривых указана величина отношения.

### Основные результаты

1. Предложена оригинальная первопринципная модель плазменного микрополя по диапазону применимости и качеству поведения превосходящая мировой уровень. Модель описывается несложными формулами и пригодна для проведения массовых расчетов.
2. Впервые построено законченное теоретическое описание эффекта обрезания статистических сумм атомов и ионов в плазме. Теория подтверждается результатами отечественных и зарубежных экспериментов.
3. Построена новая модель неидеальности плазмы строго и абсолютно точно согласованная с моделью плазменного микрополя. Тем самым впервые удалось единообразно описать оптические и термодинамические свойства вещества. Кроме того, в этой модели отсутствуют нефизичные эффекты (так называемые фазовые переходы, ненаблюдаемые в экспериментах),

предсказывавшиеся в предшествующих моделях.

4. Усовершенствован метод расчета состава плазмы, что позволило применять модель ионизационного равновесия даже при твердотельной плотности. Создана программа, позволяющая быстро (за несколько секунд на современных персональных компьютерах) рассчитывать подробные таблицы состава и термодинамических функций плазмы одного элемента в огромном диапазоне температур (1 эВ – 10 КэВ), и концентраций ( $10^{16} - 10^{24} \text{ см}^{-3}$ ).

### Литература

1. Волокитин В.С., Голосной И.О., Калиткин Н.Н. Теоретические модели уравнения состояния вещества. М.: МИФИ, 1992. – 54с.
2. Гаврилов В.Е. Диагностика и континуум излучения слабонеидеальной плазмы водорода // Оптика и спектроскопия, 1992. Т. 72. Вып. 1. С. 16-23.
3. C.F. Hooper, Jr., R.C. Mancini, D.P. Kilcrease, L.A. Woltz, M.C. Richardson, D.K. Bradley, P.A. Jaanimagi. Analysis of K- and L-shell spectra emitted from implosions of argon filled and argon/krypton filled microballoons // SPIE. High intensity laser-matter interactions. 1988. Vol. 913. P. 129-137.
4. C.A. Iglesias, J.T. Lebowitz. Electric microfield distribution in multicomponent plasmas // Phys.Rev.A, 1984, v.30, №4, p.2001-2004.
5. J.W. Dufty, D.B. Boercker, C.A. Iglesias. Electric field distributions in strongly coupled plasmas // Phys.Rev.A., 1985, v.31, №3, p.1681-1686.
6. C.A. Iglesias, H.E. DeWitt, J.T. Lebowitz, D. McGowan, W.B. Hubbard. Low-frequency electric microfield distribution in plasmas // Phys.Rev.A., 1985, v.31, №3, p.1698-1702.
7. Ю.К. Куриленков, В.С. Филинов. К теории микрополя в неидеальной плазме // Теплофизика высоких температур, 1976, т.14, №4, с.886-888.
8. Калиткин Н.Н., Ритус И.В., Миронов А.М. Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов. М.: Препр. ИПМ, 1983, №46, 27с.

## Основные результаты опубликованы в работах

1. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* Компенсированная микрополевая модель неидеальности плазмы // ДАН, 2006, том 411, вып. 1, с. 36–40.
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.* Самосогласованная компенсированная микрополевая модель неидеальности плазмы // Математическое моделирование, 2008, т.20, №1, с.61-76.
4. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* Сравнение детального состава плазмы в различных моделях. // Математическое моделирование, 2008, т.20, №4, с.69-77.
5. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* Микрополевое обрезание статистических сумм в плазме // Труды VIII Харитоновских чтений, Саров, 2006, с. 252-258.
6. *Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.* Микрополе и компенсированная модель неидеальности плазмы. // Труды IX Харитоновских чтений, Саров, 2008, с. 253-258.