

СОСТАВ ПЛОТНОЙ КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ЧАСТИЧНО-ИОНИЗОВАННОЙ ПЛАЗМЫ УГЛЕРОДА

М.Т. Габдуллин, Т.С. Рамазанов, К.Н. Джумагулова, Р. Редмер*

НИИЭТФ, КазНУ им. аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

*Институт физики, Ростокский университет, г. Росток, Германия

В данной работе на основе эффективных потенциалов взаимодействия частиц, учитывающих как эффекты экранировки на больших расстояниях, так и квантовые эффекты дифракции – на малых, рассчитаны снижения потенциалов ионизации атомов и ионов плотной квазиклассической частично-ионизованной плазмы углерода (С). Полученные результаты были применены при вычислении равновесного состава плотной квазиклассической углеродной плазмы.

Введение

В настоящее время исследователи различных стран проявляют повышенный интерес к плотной или неидеальной плазме, где существенную роль играют взаимодействия структурных элементов системы. Это связано не только с чисто академическим интересом, но и перспективой использования неидеальной плазмы в различных технологических проектах. Например, плотная плазма возникает при ядерных взрывах [1] и сверхзвуковом движении тел в плотных слоях атмосфер планет [2], при реализации идеи импульсного термоядерного синтеза, осуществляемого путем лазерного, электронного, ионного и взрывного обжаривания сферической мишени [3] и во многих других случаях, плазматронах и в технологиях использующих газозоные ядерные реакторы [4].

При исследовании любой плотной системы многих частиц необходимо знать потенциал, посредством которого взаимодействуют частицы системы. Такие потенциалы должны учитывать специфические эффекты, присущие указанной области плотностей и температур. В данной работе будем рассматривать плотную квазиклассическую плазму, состоящую из электронов, ионов и атомов. Среднее расстояние между частицами системы: $a = (3/4\pi n)^{1/3}$. Для удобства описания неустойчивой системы, какой является плазма, удобно пользоваться безразмерными параметрами, характеризующими её состояние с определенными плотностями, температурами и давлениями. Параметр, характеризующий состояние системы - это параметр связи: $\Gamma = (Ze)^2 / ak_B T$, где T - температура плазмы, k_B - постоянная Больцмана, Γ - отношение между кулоновской энергией взаимодействия и тепловой энергией. Параметр плотности определяется как: $r_s = a/a_B$, где $a_B = \eta^2 / m_e e^2$ - радиус Бора. Параметр вырождения для электронной компоненты: $\Theta = k_B T / E_F = 2(4/9\pi)^{2/3} Z^{5/3} r_s / \Gamma$, где E_F - энергия Ферми электронов.

Рассматривается гелиевая плазма, состоящая из электронов, однократно и двукратно ионизованных ионов и атомов. Концентрация плазмы равна $n_e = 10^{18} \div 10^{23}, \text{см}^{-3}$ при температуре $T_e = 10^4 \div 10^6 \text{ K}$.

1 Эффективные потенциалы взаимодействия

В данной работе при рассмотрении взаимодействия электрон-электрон и электрон-ион используется эффективный потенциал взаимодействия, учитывающий на малых расстояниях квантовомеханические эффекты дифракции, а на больших - эффекты экранировки. Этот потенциал был получен методом линейного диэлектрического отклика в работе [5]:

$$\Phi_{es}(r) = \frac{Ze^2}{\sqrt{1 - 4D_{es}^2/r_D^2}} \left(\frac{e^{-Br}}{r} - \frac{e^{-Ar}}{r} \right), \quad (1)$$

где $s = e, i$, $D_{es} = h/\sqrt{3mk_B T}$ длина волны де Бройля, $r_D = \sqrt{k_B T/4\pi n_e e^2}$ - радиус Дебая, а

$$B = \sqrt{\frac{1 - \sqrt{1 - 4D_{es}^2/r_D^2}}{2D_{es}^2}}, \quad A = \sqrt{\frac{1 + \sqrt{1 - 4D_{es}^2/r_D^2}}{2D_{es}^2}}.$$

В работе [6] методом функции диэлектрического отклика был получен эффективный потенциал, который в данной работе будет использоваться для взаимодействия ион-ионной компоненты:

$$\Phi_{ii}(r) = \frac{Z_i Z_i e^2}{\sqrt{1 - 4D_{ee}^2 k^2}} \left(\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4D_{ee}^2 k^2} \right) \frac{e^{-Br}}{r} - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{1 - 4D_{ee}^2 k^2} \right) \frac{e^{-Ar}}{r} \right). \quad (2)$$

Влияние атомов на термодинамические свойства частично-ионизованной плазмы проявляется при уменьшении концентрации свободных электронов. А для заряд – атомного взаимодействия в качестве модельного потенциала была выбрана поляризационный эффективный потенциал [7]:

$$\Phi_{sa}(r) = \frac{e^2 \alpha_p}{2r^4 \sqrt{1 - 4D_{ee}^2 / r_D^2}} \left(e^{-Br} (1 + Br) - e^{-Ar} (1 + Ar) \right), \quad (3)$$

где α_p - дипольная поляризуемость. Область вещественных значений этого потенциала определяется неравенством:

$$\Gamma < \sqrt{\frac{\pi}{6}} r_s, \quad (4)$$

что является условием применимости псевдопотенциальной модели (1) – (3) и ограничением при расчетах термодинамических функций квазиклассической частично-ионизованной плазмы.

2 Учет взаимодействия частиц в химическом потенциале

Взаимодействие частиц определенным образом сказывается на общем энергетическом фоне системы. Это приводит к тому, что характер взаимодействия частиц влияет на значение химического потенциала, который характеризует количество свободной энергии системы, приходящееся на одну частицу:

$$\mu^\alpha = \frac{\partial F}{\partial N_\alpha}. \quad (5)$$

Используя определение химического потенциала, нетрудно найти поправку к химическому потенциалу:

$$\Delta\mu_a = \left(\frac{\partial \Delta F}{\partial N_a} \right)_{T,V}, \quad (6)$$

Что касается остальных термодинамических величин, прежде всего свободной энергии, ее связь с корреляционной функцией более сложна. Она не выражается непосредственно через корреляционные функции с помощью соотношений для внутренней

энергии и давления. Свободную энергию F можно найти из известного соотношения Клаузиуса – Гельмгольца:

$$\frac{E}{T^2} = -\frac{\partial F}{\partial T T}, \quad (7)$$

где E – добавка к энергии плазмы, обусловленная взаимодействием частиц:

$$\Delta E = \frac{V}{2} \sum_{\alpha} eZ_{\alpha} n_{\alpha} \phi_{\alpha}. \quad (8)$$

Здесь V – объем плазмы; ϕ_{α} – потенциал взаимодействия частиц сорта α .

Из этого соотношения мы можем выразить поправку к свободной энергии системы ΔF , обусловленную взаимодействием частиц, через параметр связи $\Gamma = \Gamma(n, T)$ и корреляционную энергию ΔE с помощью термодинамического соотношения:

$$\frac{\Delta F}{Nk_B T} = \int_0^{\Gamma} \frac{d\Gamma}{\Gamma} \left[\frac{\Delta E}{Nk_B T} \right]. \quad (9)$$

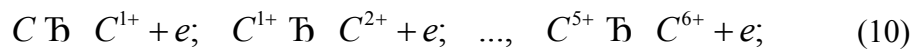
Для получения поправки к химическому потенциалу подставим соотношение (8) в (9) и результат продифференцируем с помощью уравнения (6). Эти уравнения решались численными методами.

3 Состав и термодинамические свойства плазмы углерода

В данном разделе исследуется ионизационное равновесие частично ионизованной углеродной плазмы, состоящей из электронов, атомов, однократно, ..., k -кратно ионизованных ионов. Общая плотность ионов в такой плазме определяется как:

$$n_i = n_{1+} + \dots + n_{k+}.$$

Если пренебречь образованием молекул и нейтральных кластеров, то в такой плазме происходят следующие ионизационные процессы между частицами различных сортов:



е k -кратность заряда;

$$E_{ion}^{1+} = 11,26 \text{ эВ} - \text{энергии основного состояния однократно ионизованных ионов};$$

$$E_{ion}^{2+} = 24,384 \text{ эВ} - \text{энергии основного состояния двукратно ионизованных ионов};$$

$$E_{ion}^{3+} = 47,89 \text{ эВ} - \text{энергии основного состояния трехкратно ионизованных ионов};$$

$$E_{ion}^{4+} = 77,47 \text{ эВ} - \text{энергии основного состояния четырехкратно ионизованных ионов};$$

$$E_{ion}^{5+} = 392,09 \text{ эВ} - \text{энергии основного состояния пятикратно ионизованных ионов};$$

$$E_{ion}^{6+} = 492,00 \text{ эВ} - \text{энергии основного состояния шестикратно ионизованных ионов}.$$

Плотность частиц может быть получена из системы уравнений, выражающей условие химического равновесия при заданных температурах и полной плотности частиц [8,9]:

$$\begin{aligned} \mu_0 + E_{ion}^{1+} &= \mu_{1+} + \mu_e \\ \dots & \\ \mu_{(k-1)+} + E_{ion}^{k+} &= \mu_{k+} + \mu_e \end{aligned} \quad (11)$$

где E_{ion}^{1+} , E_{ion}^{2+} – энергии основного состояния однократно и двукратно ионизованных ионов, μ_e , μ_0 , μ_{1+} , ..., μ_{5+} – химические потенциалы. Тогда выражение для химического потенциала для неидеальной плазмы можно записать как:

$$\mu_k = \mu_k^{id} + \mu_k^{int} \quad (12)$$

Для атомов и ионов идеальную часть химического потенциала можно выразить следующим выражением:

$$\mu_k = k_B T \ln(n_k \Lambda_k / g_k) \quad (13)$$

где для углерода спиновый фактор $g_0=1$, $g_1=2$, $g_2=1$, ..., $g_6=1$.

Записанные соотношения позволяют записать систему уравнений Саха для расчета состава плазмы с максимальной кратностью ионизации, равной двум, следующим образом:

$$\begin{aligned} n_0 &= \frac{1}{2} n_{1+} \exp[\beta(\mu_e^{id} + E_{ion}^{1+} + \Delta\mu_1)] \\ \dots & \\ n_{5+} &= 2n_{6+} \exp[\beta(\mu_e^{id} + E_{ion}^{6+} + \Delta\mu_6)] \end{aligned} \quad (14)$$

где $\beta = 1/k_B T$, величины $\Delta\mu_k = \mu_e^{nonid} + \mu_k^{nonid} - \mu_{k-1}^{nonid}$ являются поправками на неидеальность к химическим потенциалам и приводят к сдвигу химического равновесия относительно идеального газового приближения Саха. Поправки к химическому потенциалу заряженной подсистемы рассчитывались на основе эффективных потенциалов взаимодействия (1) и (2).

Для решения такой системы необходимо ее дополнить еще двумя уравнениями, законом сохранения числа ядер:

$$\sum_{k=1}^k n_k + n_0 = const \quad (14)$$

и законом сохранения полного заряда в системе:

$$\sum_{k=1}^k k n_k = n_e \quad (15)$$

Данная система уравнений решалась численными методами. Поправка, обусловленная поляризационным взаимодействием зарядов с нейтралами, рассматривалась в приближении вириального коэффициента B^{PP} [8,9]:

$$\mu_{ec}^{nonid} = n_c B^{PP} \quad , \quad B^{PP} = \int d^3 r \Phi_{ea}^{PP}(r) \quad (16)$$

Состав углеродной плазмы был получен с помощью численных методов. Результаты расчетов представлены на рисунках 1-2. Снижения потенциала взаимодействия в углеродной плазме решалось на основе потенциалов (1) - (3). На рисунке 1 представлены кривые относительных долей сортов частиц в зависимости от температуры при постоянной концентрации $n = 10^{22} / \text{cm}^3$. С увеличением температуры концентрация электронов в системе растет. На рисунке 2 кривые относительных долей сортов частиц в зависимости от температуры при постоянной концентрации $n = 1.4 \times 10^{22} / \text{cm}^3$ в сравнении с результатами PROMTA04 [10]. Отличие кривых обусловлено использованием различных методов. Результаты хорошо согласуются с результатами других авторов.

Далее полученные результаты были использованы при расчете равновесного состава и влияния эффектов неидеальности на поведения ионизационной кривой (рисунок 2). Было показано, что учет квантового эффекта дифракции сдвигает ионизационную кривую в область низких степеней ионизации по сравнению с классической (дебаевской) теорией.

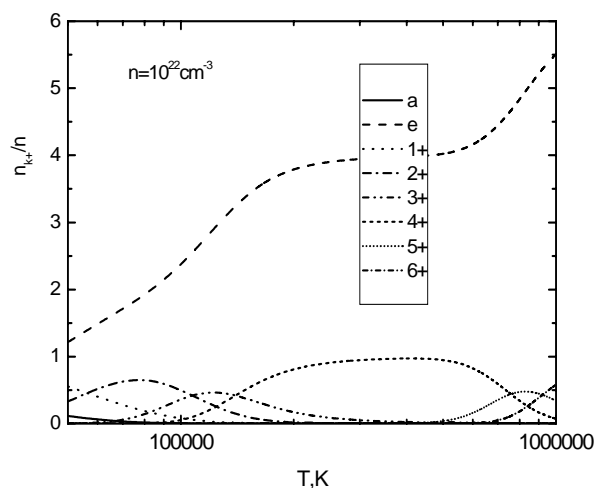


Рисунок 1. - Состав неидеальной С плазмы при $n = 10^{20} / \text{cm}^3$ как функция от температуры

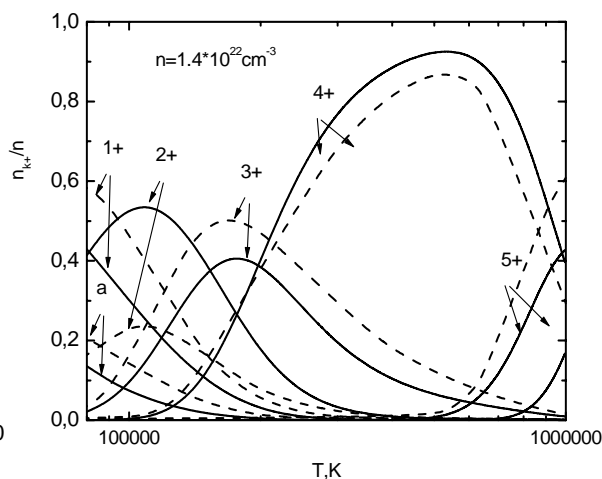


Рисунок 2. - Состав неидеальной С плазмы при $n = 1.4 \times 10^{22} / \text{cm}^3$: сплошная линия – результаты представленной работы; пунктирная линия – результаты работы [10].

Выводы

Таким образом, на основе проведенных исследований в данной работе можно заключить, о том, что в рамках используемых эффективных потенциалов взаимодействия частиц можно адекватно рассчитать термодинамические характеристики и равновесный состав плотной частично-ионизованной углеродной плазмы. Так как в плазме, находящейся в таком состоянии, учет на больших расстояниях эффектов экранировки, а на малых – квантовых эффектов дифракции становится необходимым.

Работа была выполнена в рамках гранта ИРИ - 8/2009 Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Литература

1. Ragan C.E., Silbert M.G., Diven B.C. Shock compression of molybdenum to 2.0 TPa by means of a nuclear explosion // J. Appl. Phys. - 1997. - Vol. 48. - P. 2860.

2. Кучеренко В.И., Павлов Г.А., Грязнов В.К., Сон Э.Е., Фортов В.Е. Теплофизические свойства плазмы смеси гелия с водородом. - Черногоровка: Препринт ОИХФ, 1978. - С. 209.

3. Прохоров А.М., Анисимов С.И., Пашинин П.П. Лазерный термоядерный синтез // УФН. - 1976. - Т. 119. - С. 401.

4. Thom K., Schneider R.T. Research of Uranium Plasmas and their Technological Applications // Proceedings of Symposium in Gainesvills Florida / ed. NASA. - Washington, 1971. - P. 115.

5. Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. Effective screened potentials of strongly coupled semmiclassical plasma // Phys. Plasmas. 2002, vol.9, No.9, p.3758-3761.

6. Габдуллин М.Т. Эффективный потенциал ион-ионного взаимодействия и структурные свойства плотной квазиклассической плазмы // Вестник КазНУ. Серия физическая. - 2006. - № 2. - С. 26-29.

7. Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Omarbakiyeva Yu.A. Effective polarization interaction potentials «charge-atom» for the partially ionized dense plasma // Phys. Plasmas. - 2005. - Vol.12. - 092702.

8. Redmer R. Electrical conductivity of dense metal plasmas // Phys.Rev. 1998, vol.59, No.1, p.1073-1081.

9. Redmer R., Röpke G. Formation of clusters in dense alkali plasmas // Contrib. Plasma Phys. - 1989. - Vol. 29. - P. 343.

10. Haun J., Kosse S., Kunze H.-J., Schlanges M., Redmer R. Contrib. Plasma Phys. 41, 2-3 275-278 (2001).

ТЫҒЫЗ КВАЗИКЛАССИКАЛЫҚ ЖАРТЫЛАЙ-ИОНДАЛҒАН КӨМІРТЕГІ ПЛАЗМАСЫНЫҢ ҚҰРАМЫ

М.Т. Ғабдуллин, Т.С. Рамазанов, Қ.Н. Жұмағұлова, Р. Редмер

Бұл жұмыста алыс арақашықтықта экрандалу эффектісін және жақын арақашықтықта дифракцияның кванттық эффектілерін ескеретін бөлшектердің өзара әсерлесу псевдопотенциалдық моделдері негізінде жартылай иондалған квазиклассикалық көміртегі плазмасының иондары мен атомдарының иондалу потенциалының азаюы есептелген. Алынған нәтижелер тығыз квазиклассикалық көміртегі плазмасының тепе-теңдіктегі құрамын есептеу үшін қолданылды.

COMPOSITION OF A DENSE SEMICLASSICAL PARTIALLY IONIZED CARBON PLASMA

M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, K.N. Dzhumagulova, R. Redmer

The composition of a dense semiclassical partially ionized carbon plasma were calculated on the basis of modified Saha equation. The lowering of ionization potentials was derived by the effective potentials, witch take into account diffraction effects on the small distance and screening effects on the long distance.