

УДК 539.23:621.793

²М.Т. Габдуллин*, ²Т.С. Рамазанов,
²Г.Б. Ахтанова, ³Р. Редмер¹Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа, Казахстан, г. Алматы²Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,
Казахстан, г. Алматы³Институт физики плазмы, Ростокский университет, Германия, г. Росток

*E-mail: gabdullin@physics.kz

Состав плазмы бериллия

В данной работе был исследован состав плотной неидеальной плазмы бериллия с помощью уравнений Саха с учетом снижения потенциала ионизации. Состав плотной неидеальной плазмы был получен численными методами при решении уравнения Саха с учетом снижения потенциалов ионизации атомов и ионов. В качестве модели взаимодействия используются эффективные потенциалы, которые учитывают на больших расстояниях эффект экранировки и на малых расстояниях – квантово-механические эффекты дифракции. Для рассмотрения взаимодействия заряда с нейтральными атомами был выбран поляризационный потенциал, учитывающий эффекты экранировки, квантовые эффекты дифракции электрона и поляризацию атома. Степень ионизации была определена как отношение числа свободных электронов к полному числу ядер в плазме. При вычислении состава ионизованной плазмы применялась химическая модель. В такой модели плазма состоит из всевозможных сортов частиц системы. Полученная система нелинейных уравнений Саха с учетом снижения потенциалов ионизации решалась численными методами. В данной работе рассматриваются атомы бериллия, которые с повышением температуры ионизируются и превращаются в ионы и электроны. С повышением температуры образуются голые ядра.

Ключевые слова: неидеальная плазма, эффективные потенциалы, состав плазмы, уравнение ионизации.

М.Т. Габдуллин, Т.С. Рамазанов,
Г.Б. Ахтанова, Р. Редмер

Тығыздық бериллий плазманың құрамы

Еңбекте эффективті потенциалды алудағы диэлектрлік қайта әсерлесу функция әдісінің қолданылуы қарастырылған. Бериллий плазмасының иондалу тепе-теңдігін есептеу барысында иондалу потенциалының төмендеуін ескеретін Саха теңдеуінің қолданылуы талданған. Идеал емес квазиклассикалық жартылай иондалған бериллий плазмасының құрылымдық қасиеттерін зерттеу кезінде жақын арақашықтықта дифракция кванттық эффектісін, ал алыс арақашықтықта экрандалу эффектісін ескеретін псевдо-потенциалдық модельдері қолданылған. Заряд-атом әсерлесуі поляризацияланған потенциалының экрандалған түрімен сипатталған. Осы эффективтік потенциалдық модельдері негізінде химиялық потенциал – бериллий плазмасы есептелген. Бериллий плазманың құрамында атомдар және иондар, ядролар бар.

Түйін сөздер: эффективті потенциал, Саха теңдеуі, идеал емес плазма.

M.T. Gabdullin, T.S. Ramazanov, G.B. Akhtanova, R. Redmer
Composition of dense beryllium plasmas

In the present paper the composition of dense beryllium plasma by solving the Saha equations with corrections due to non-ideality was investigated. The lowering of the ionization potentials is calculated on the basis of effective potentials by taking into account screening and quantum diffraction effects. The contribution from the polarization of neutral atoms was calculated via the linearized virial coefficient for the interaction of electrons with atoms. The number density varies in the range $n_e = 10^{18} \div 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ and the temperature domain considered here is

$T = 10^4 \div 10^6 \text{ K}$. In considered range of density and temperature the plasma changes from atom state to full ionized plasma with the maximum degree of ionization. The ionization degree was determined as relation between the number density of free electrons to number density of nuclear in plasma. The composition of dense beryllium plasma, which consists of electrons, ions, and atoms, was considered on the basis of chemical model. Obtained system of nonlinear Saha equations was calculated by numerical methods.

Key words: non-ideal plasma; effective potentials; ionization equilibrium; plasma composition.

Введение

Развитие экспериментальной техники в последние десятилетия привело к возможности получения и исследования вещества находящегося в «экстремальных условиях». В состоянии с экстремальными значениями неидеальная плазма реализуется в ряде проектов и энергетических устройствах, действие которых основано на импульсной локальной концентрации энергии в плотных средах. Одним из таких состояний является неидеальная плазма, образующаяся в реакторах [1-5].

Неидеальная плазма представляет интерес, как при решении прикладных задач, так и для расширения наших знаний о фундаментальных явлениях природы, свойствах и строении вещества [5-13].

Для удобства описания неустойчивой системы, какой является плазма, удобно пользоваться безразмерными параметрами, характеризующими её состояние с определенными плотностями и температурами. Среднее расстояние

между частицами: $a = (3/4\pi n)^{1/3}$. Параметр связи – $\Gamma = (Ze)^2 / a k_B T$. Параметр плотности определяется как $r_s = a / a_B$, где $a_B = \hbar^2 / m_e e^2$ – радиус Бора. Параметр плотности уменьшается с увеличением плотности. В представленной работе исследуется область плотностей и температур: $n = 10^{20} \div 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, $T_e = 5 \times 10^4 \div 10^6 \text{ K}$. Был определен состав плазмы бериллия, состоящей из электронов, ионов, атомов и ядер.

Эффективные потенциалы взаимодействия

В работе [14] методом линейного диэлектрического отклика была получена псевдопотенциальная модель, которая использовалась в данной работе для электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействия.

Аналитическое выражение для потенциала электрон-электронного и электрон-ионного взаимодействия имеет вид:

$$\Phi_{\alpha\beta}(r) = \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{\sqrt{1 - 4\lambda_{\alpha\beta}^2 / r_D^2}} \left(\frac{e^{-Br}}{r} - \frac{e^{-Ar}}{r} \right), \quad (1)$$

$$\text{где } A^2 = \frac{1}{2\lambda^2} \left(1 + \sqrt{1 - \lambda_{\alpha\beta}^2 / r_D^2} \right),$$

$$B^2 = \frac{1}{2\lambda^2} \left(1 - \sqrt{1 - \lambda_{\alpha\beta}^2 / r_D^2} \right),$$

$Z_\alpha e$, $Z_\beta e$ – электрические заряды частиц сорта α и β , $\lambda_{\alpha\beta} = \hbar / \sqrt{2\pi m_{\alpha\beta} k_B T}$ – тепловая длина

волны Де-Бройля, $m_{\alpha\beta} = m_\alpha m_\beta / (m_\alpha + m_\beta)$ – приведенная масса частиц сорта α и β , $r_D = \left(k_B T / \left(4\pi e^2 \sum_j n_j Z_j^2 \right) \right)^{1/2}$ – радиус Дебая.

Эффективный потенциал для ион-ионного взаимодействия [15]:

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

Данные псевдопотенциалы учитывают на малых расстояниях квантовые эффекты дифракции, а на больших – многочастичные эффекты экранирования поля зарядов. При построении данной модели по описанному выше методу использовался в качестве микропотен-

циала потенциал, учитывающий квантовые эффекты дифракции.

Поляризационный потенциал учитывает взаимодействия между зарядами и атомами в ионизированной неидеальной плазме [16]:

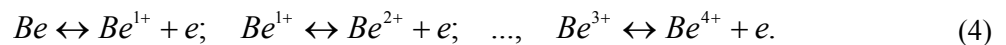
$$\Phi_{sa}(r) = \frac{e^2 \alpha_p}{2r^4 \sqrt{1 - 4\lambda_{ee}^2 / r_D^2}} (e^{-Br} (1 + Br) - e^{-Ar} (1 + Ar)), \quad (3)$$

где α_p – поляризуемость атома.

Состав полностью ионизированной плазмы

Вспользуемся химической моделью плазмы для рассмотрения состава плазмы бериллия. Как известно, с ростом температуры и с уменьшением плотности растет и кратность ионизации. При рассматриваемых температурах и плотностях состав такой плазмы будет меняться от атомарной до одно-, двух-, и трех-

кратно ионизированной. Взаимодействие между частицами дает снижение потенциала ионизации по сравнению с изолированными атомами и ионами. Рассмотрение химического равновесия традиционно начинается с определения возможных реакций в системе. Пренебрегая образованием молекул, рассмотрим всевозможные реакции в такой плазме [17,18]:



Плотность частиц может быть получена из системы уравнений, выражающей условие химического равновесия при заданных температурах и суммарной плотности частиц разных сортов:

$$\begin{aligned} \mu_0 + E_{ion}^{1+} &= \mu_{1+} + \mu_e \\ \mu_{1+} + E_{ion}^{2+} &= \mu_{2+} + \mu_e \\ \dots & \\ \mu_{(n-1)+} + E_{ion}^{n+} &= \mu_{n+} + \mu_e \end{aligned}, \quad (5)$$

где E_{ion}^{k+} – энергия основного состояния k -кратно ионизированных ионов и т.д., $\mu_e, \mu_0, \mu_{1+} \dots \mu_{n+}$ – химические потенциалы.

Тогда выражение для химического потенциала для неидеальной плазмы можно записать как:

$$\mu_k = \mu_k^{id} + \mu_k^{int}. \quad (6)$$

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

$$\mu_k = k_B T \ln(n_k \Lambda_k / g_k), \quad (7)$$

где для бериллия спиновый фактор $g_0=4, g_{1+}=2, g_{2+}=1, g_{3+}=2, g_{4+}=1$ [19].

Приведенные соотношения позволяют записать систему уравнений Саха для расчета состава плазмы с максимальной кратностью ионизации следующим образом:

$$\begin{aligned}
 n_0 &= \frac{g_0}{g_{1+}} n_{1+} \exp\left[\beta(\mu_e^{id} + E_{ion}^{1+} + \Delta\mu_{1+})\right] \\
 n_{1+} &= \frac{g_{1+}}{g_{2+}} n_{2+} \exp\left[\beta(\mu_e^{id} + E_{ion}^{2+} + \Delta\mu_{2+})\right] \\
 &\dots \\
 n_{(k+)-1} &= \frac{g_{(k+)-1}}{g_{k+}} n_{k+} \exp\left[\beta(\mu_e^{id} + E_{ion}^{k+} + \Delta\mu_{k+})\right],
 \end{aligned} \tag{8}$$

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.

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

$$\sum_{k=1}^5 n_k + n_0 = const, \tag{9}$$

и законом сохранения полного заряда в системе:

$$\sum_{k=1}^5 kn_k = n_e. \tag{10}$$

Соотношение между концентрациями компонент такой плазмы дает нам степень ионизации плазмы α_k и относительные доли компонент. Эти соотношения можно представить в виде выражений:

$$\alpha_e = \frac{n_e}{(n_0 + n_i)}, \quad \alpha_{k+} = \frac{n_{k+}}{(n_0 + n_i)}, \tag{11}$$

где $k = 0, i, \dots, e$.

Данная система уравнений решалась численными методами. Поправка, обусловленная поляризационным взаимодействием зарядов с нейтралами, рассматривалась в приближении вириального коэффициента B^{PP} [20-22]:

$$\mu_{eHe}^{nonid} = n_{He} B^{PP}, \quad B^{PP} = \int d^3r \Phi_{ed}^{PP}(r). \tag{12}$$

В качестве потенциала взаимодействия заряда с нейтральными атомами был выбран поляризационный потенциал, учитывающий эффекты экранировки, квантовые эффекты дифракции электрона и поляризацию атома.

Результаты

Результаты вычисления с помощью системы уравнений (5-8) представлены на рисунках (1-4). Снижения потенциала ионизации для плазмы Be в сравнении с дебаевским приближением представлены на рисунке 4 при $n = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Учет, как эффектов экранировки, так и квантовых эффектов дифракции, при вычислении снижения потенциалов ионизации сдвигает ионизационные кривые в область более высоких температур по сравнению с дебаевским приближением. Поскольку эффект дифракции ослабевает, взаимодействие между частицами приводит к уменьшению абсолютного значения поправки к химическому потенциалу или снижению потенциалов ионизации.

На рисунке (2) представлены кривые как зависимости состава плазмы от температуры при $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ в сравнении с результатами Керли [23] и данными программного пакета COMPTRA04 [24]. Отличие кривых обусловлено рассмотрением квантовых эффектов дифракции с помощью эффективных потенциалов. На рисунке (3) изображена степень ионизаций Be при различных температурах.

Вывод

В сравнении с теорией Дебая потенциал ионизации снижен, это обусловлено квантовыми эффектами дифракции. С помощью псевдо-потенциальной модели мы можем вычислить состав плазмы удовлетворяющие данным параметрам T и n .

Данная работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта 1116/ГФ.

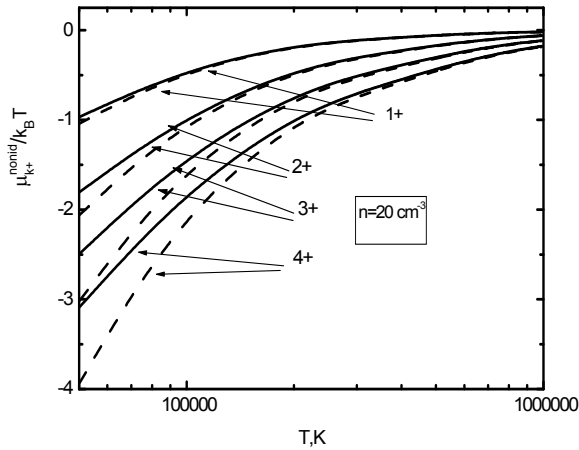


Рисунок 1 – Химический потенциал идеальной плотной Be плазмы. Сплошные линии-Дебая, пунктирные линии – данная работа

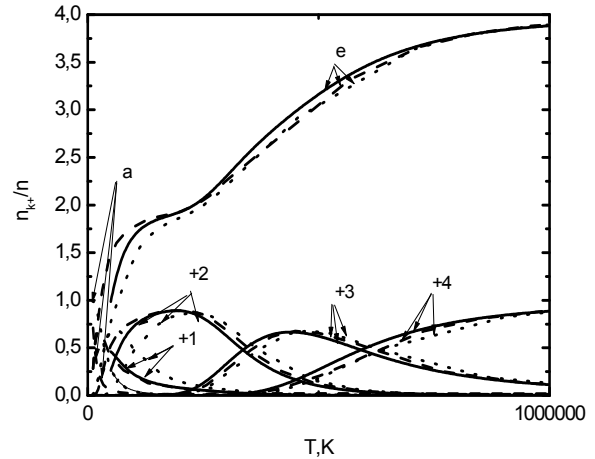


Рисунок 2 – Состав Be плазмы с плотностью $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$. Сплошные линии – данная работа, пунктирные – G.I. Kerley [23], точечные – Comptro4 (R.Redmer) [24]

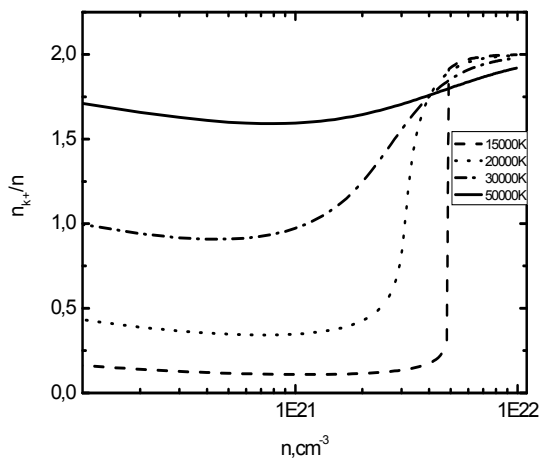


Рисунок 3 – Степень ионизации Be плазмы при различных температурах

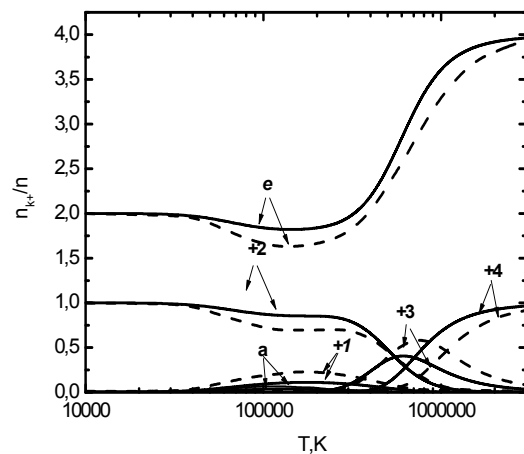


Рисунок 4 – Состав Be плазмы с плотностью $\rho = 1.85 \text{ g/cm}^3$. Сплошные линии – данная работа, пунктирные – Comptro4 (R.Redmer)

References

- 1 Frontiers in High Energy Density Physics, edited by the National Research Council (National Academic Press, Washington, 2003).
- 2 Redmer R.A., Röpke G., Morales F., Kilimann K. // Phys. Fluids B 2. – 1990. – P.390.
- 3 Ebeling W., Förster A., Fortov V.E., Gryaznov V.K., and Polishchuk A.Y. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas. – Teubner Verlag, Stuttgart-Leipzig, 1991.

- 4 Zaghoul M.R. // *Phys. Plasmas*, 2003. – Vol. 10. – P. 527.
- 5 Zaghoul M.R. Reduced formulation and efficient algorithm for the determination of equilibrium composition and partition functions of ideal and nonideal complex plasma mixtures // *Phys. Rev. E*, 2004. – Vol. 69. – P. 026702.
- 6 Harris G.M., Roberts J.E., and Trulio J.G. Equilibrium properties of a partially ionized plasma // *Phys. Rev.*, 1960. – Vol. 119. – P. 1832-1841.
- 7 Mihalas D., Däppen W., Hummer D.G. The equation of state for stellar envelopes // *Astrophys. J.*, 1988. – Vol. 331. – P.794-815.
- 8 Potekhin A.Y., Chabrier G. Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas. II. Extension to relativistic densities and to the solid phase// *Phys. Rev. E*, 2000. – Vol. 62. – P. 8554.
- 9 Zaghoul M.R. Integrability criterion for lowering of ionization potentials and formulation of the solution of the inverse problem of constructing consistent thermodynamic functions of nonideal plasmas // *Phys. Rev. E*, 2009. – Vol. 79. – P. 016410.
- 10 Aparicio J.M., Chabrier G. Free-energy model for fluid atomic helium at high density// *Phys. Rev. E*, 1994. – Vol. 50. – P. 4948-4960.
- 11 Winisdoerffer C., Chabrier G. Free-energy model for fluid helium at high density // *Phys. Rev. E*, 2005. – Vol. 71. – P. 026402.
- 12 Saumon D., Chabrier G., Van Horn H.M. An equation of state for low-mass stars and giant planets // *Astrophys. J., Suppl. Ser.* – 1995. – V. 99. – P.713-741.
- 13 Potekhin A.Y., Massacrier G., Chabrier G. Equation of state for partially ionized carbon at high temperatures // *Phys. Rev. E*. – 2005. – V. 62. – P. 046402.
- 14 Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N. Effective screened potentials of strongly coupled semiclassical plasma. // *Phys. Plasmas*. 2002, vol.9, No.9, P. 3758-3761.
- 15 Ramazanov T.S., K.N.Dzhumagulova, M.T.Gabdullin. Effective potentials for ion-ion and charge-atom interactions of dense semiclassical plasma. // *Phys. Plasmas*. – 2010. – Vol. 17, No.4. – P. 042703 (6 pp).
- 16 Ramazanov T.S., Dzhumagulova K.N., Omarbakiyeva Yu.A.. Effective polarization interaction potentials “charge-atom” for partially ionized plasma. // *Phys. Plasmas*, 2005, 12, №9, 092702-1-4.
- 17 Redmer R. Electrical conductivity of dense metal plasmas // *Phys.Rev.* 1998. - Vol.59, No.1. - P.1073-1081.
- 18 Kuhlbrodt S., Redmer R. Transport coefficients for dense metal plasmas // *Phys. Rev. E*. – 2000. – Vol. 62. – P. 7191-7200.
- 19 Smirnov B.M. *Physics of atom and ion.* – M.: Nauka, 1986.
- 20 Ebeling W., Kraeft W.-D., Kremp D., *Theory of bound states and ionization equilibrium in plasmas and solids.* - Berlin: Akademie-Verlag, 1976.
- 21 Redmer R. Thermodynamic and transport properties of dense, low-temperature plasmas // *Phys. Rep.* – 1997. – Vol. 282. – P. 35-157.
- 22 Redmer R., Röpke G. // *Contrib. Plasma Phys.* – 1989. – Vol. 29. – P. 343.
- 23 Kerley G.I. Theory of Ionization Equilibrium: An Approximation for the Single Element Case // *J. Chem. Phys.* – 1986. – Vol.85, № 9. – P. 5228-5231.
- 24 Kuhlbrodt S., Holst B., Redmer R. COMPTRA04 a Program Package to Calculate Composition and Transport Coefficients in Dense Plasmas // *Contrib. Plasma Phys.* – 2005. – V. 45, N. 2. – P.73-88.