

Российский Федеральный Ядерный Центр —
Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики

**Развитие химической модели плазмы
многоэлектронных ионов для уточнения
уравнений состояния и непрозрачностей
плотного ионизованного вещества**

П.А. Лобода, В.В. Попова, А.А. Шадрин

Основные проблемы при описании термодинамики плотной равновесной плазмы из «первых принципов»

- Отсутствие прямых экспериментальных данных для $P(\rho, T)$, $E(\rho, T)$ — отдельные данные по ударной сжимаемости.
- Плазма представлена многоэлектронными ионами с незаполненными оболочками \Rightarrow явный учёт спектра всех возможных возбуждённых состояний ионов (с учётом его обрезания) затруднителен, либо в случае тяжёлых веществ практически нереален.
- Сложность построения моделей для адекватного описания эффектов неидеальности в плотной плазме в широкой области (ρ, T) .

Химическая модель плотной равновесной плазмы многозарядных ионов

В «химической» модели плазма рассматривается как термодинамически равновесная смесь ионов разных сортов, обладающих внутренними степенями свободы (возбуждёнными состояниями), и свободных электронов.

Свободная энергия Гельмгольца

$$F(\rho, T, N) = \sum_{Q=0}^Z [F_Q^{(id)} + F_Q^{(bound)}] + F_e^{(id)} + \Delta F$$

$$N = \{ \{ N_Q \}, N_e \}, \quad \beta = 1/k_B T$$

$$F_Q^{(id)} = k_B T N_Q \left[\ln(\lambda^3 \rho N_Q) - 1 \right]$$

— идеально-газовый вклад ионов;

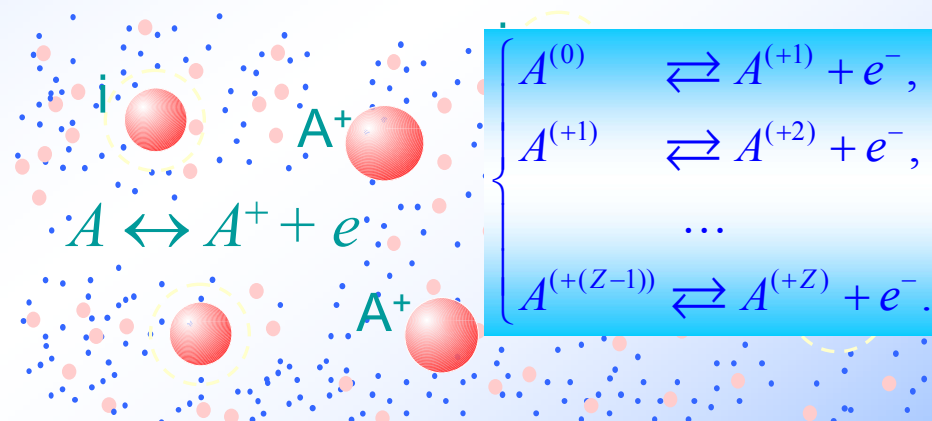
$$F_Q^{(bound)} = -k_B T N_Q \ln \tilde{U}_Q$$

— вклад связанных состояний иона с Q связанными электронами;

(\tilde{U}_Q — статистическая сумма по связанным состояниям Q-иона);

$$F_e^{(id)} = \frac{4}{\sqrt{\pi} \rho \lambda_e^3} \left(\mu_e I_{1/2}(\beta \mu_e) - \frac{2}{3} k_B T I_{3/2}(\beta \mu_e) \right)$$

— идеально-газовый вклад свободных (частично вырожденных) электронов;



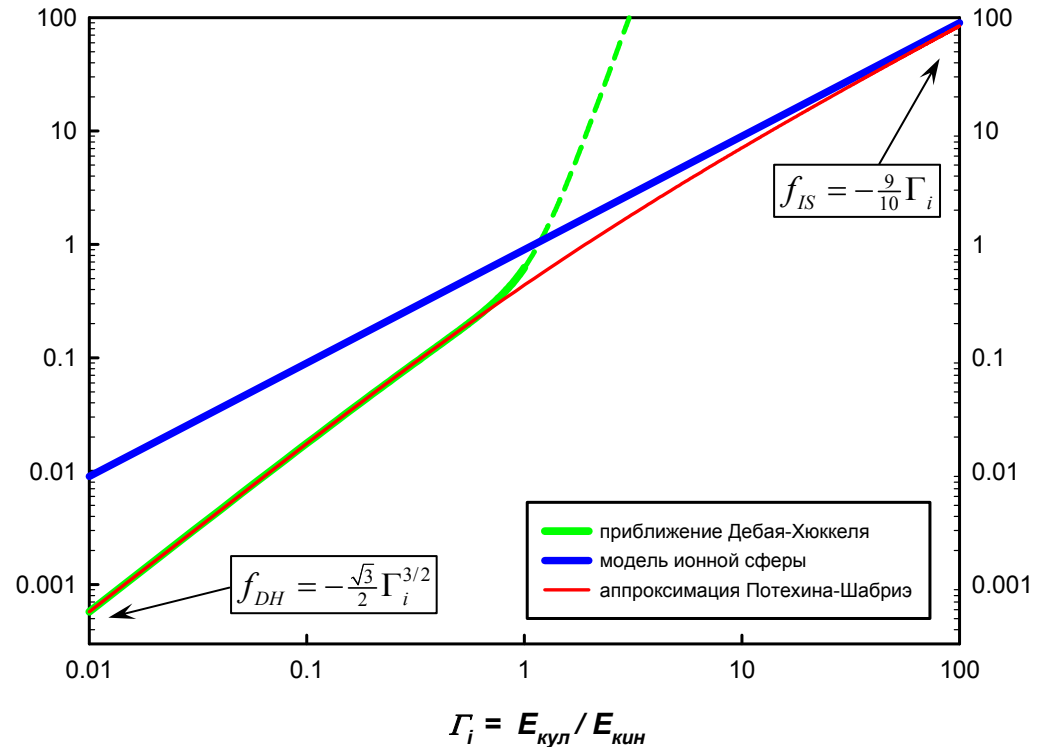
В.К. Грязнов, И.Л. Иосилевский. PNP-13, Черногоровка (2009)

$\Delta F \equiv \Delta F(\rho, T, N)$ — вклад межчастичного взаимодействия;

Кулоновское взаимодействие заряженных частиц (обобщение результатов расчётов, полученных для полностью ионизованной однокомпонентной плазмы ионов с зарядом Z на случай частично-ионизованной плазмы с $\langle Z \rangle = Z$)

$$\Delta F_c(\rho, T, N) = Nk_B T (f_{ii} + f_{ie} + f_{ee})$$

Интерполяция между пределом Дебая-Хюккеля и результатами расчётов ОКП методом Монте-Карло



Учёт эффектов собственных (исключённых) объёмов ионов (однокомпонентная модель твердых сфер, обобщённая на случай смеси через параметр упаковки):

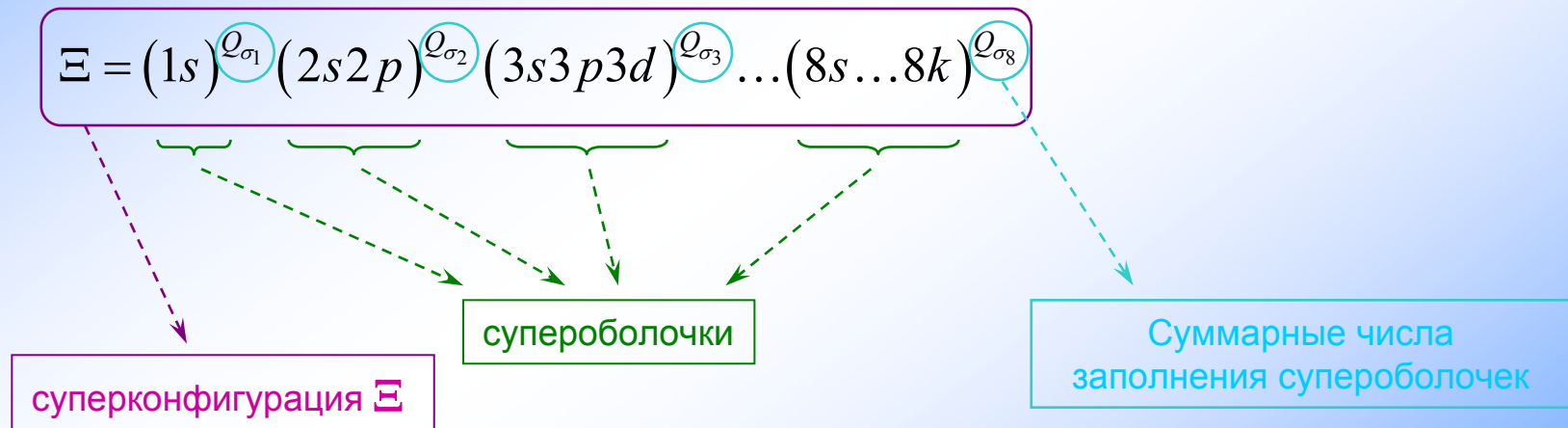
$$\Delta F_{HS}(\rho, T, N) = Nk_B T \cdot \frac{4\eta - 3\eta^2}{(1-\eta)^2}, \quad \eta = \frac{V_{\text{ионов}}}{V_{\text{плазмы}}} \quad - \quad \text{параметр упаковки.}$$

Суперконфигурационный (SC) подход для расчёта статсумм ионов:

- В SC-модели множество всех детальных конфигураций представляется множеством т.н. суперконфигураций Ξ , каждая из которых объединяет совокупность атомных конфигураций с близкими средними значениями энергии. В результате число суперконфигураций Ξ может быть существенно меньшим числа исходных конфигураций C .

$$U_Q(T) = \sum_C U_C \quad \longrightarrow \quad U_Q(T) = \sum_{\Xi} U_{\Xi}.$$

Пример разбиения атомных оболочек на супероболочки σ :



- Число суперконфигураций = числу возможных комбинаций чисел заполнения $\{Q_{\sigma}\}$ супероболочек, удовлетворяющих (для данного примера):

$$\sum_{\sigma} Q_{\sigma} = Q \quad \text{при условии} \quad \{Q_{\sigma}\} \leq 2n^2.$$

Рекурсивные формулы для неявного расчета статсумм ионов в рамках SC подхода:

$$E_C \approx E_C^{(0)} + \overline{\Delta E_{\Xi}}, \quad \text{где} \quad E_C^{(0)} = \sum_{s \in C} q_s \varepsilon_s, \quad \overline{\Delta E_{\Xi}} = \overline{(E_C - E_C^{(0)})_{\Xi}}$$

$$U_Q(T) = \sum_{\Xi} U_{\Xi}, \quad U_{\Xi} = e^{-\beta \overline{\Delta E_{\Xi}}} \cdot U_{\Xi}^{(0)},$$

$$\text{где} \quad U_{\Xi}^{(0)} = \prod_{\sigma \in \Xi} U_{\sigma} = \sum_{\sum_s q_s = Q_{\sigma}} \prod_{s \in \sigma} \binom{g_s}{q_s} \cdot X_s^{q_s}, \quad X_s = e^{-\beta \varepsilon_s}.$$

A. Bar-Shalom, et al., Phys. Rev. A., **40**, 3183 (1989); J. Oreg, et al., Phys. Rev. E, **55**, 5874 (1997).

$$Q_{\sigma} U_{Q_{\sigma}} = \sum_{i=0}^{Q_{\sigma}-1} U_i \chi_{Q_{\sigma}-i}, \quad \chi_k = \sum_s \left(-g_s (-X_s)^k \right), \quad i < Q_{\sigma}, \quad U_0 = 1.$$



F. Gilleron, J.C. Pain. *Stable method for the calculation of partition functions in the superconfiguration approach.* Phys. Rev. E, **69**, 056117 (2004).

$$U_{Q_{\sigma}} = \widehat{U}_{Q_{\sigma}} e^{-\beta [\Omega(\{q_s^*\}) + Q_{\sigma} \lambda_{Q_{\sigma}}]},$$

$$\text{где} \quad \widehat{U}_{t;s} = \sum_{q_s=0}^{\min(t, g_s)} U_{t-q_s; s-1} e^{-\beta \Delta \Omega_s(q_s)}, \quad \text{где} \quad 0 \leq t \leq Q_{\sigma}, \quad s \in \sigma, \quad U_{0;0} = 1.$$

Модифицированные статсуммы ионов на основе SC подхода:

- учёт возмущения спектра связанных состояний ионов плазменным микрополем на основе формализма вероятностей заселения (Хаммер, Михалас (1988))

$$\tilde{U}_Q(\rho, T, \mathbf{N}) = \sum_{\Xi} \tilde{U}_{\Xi},$$

$$\text{где } \tilde{U}_{\Xi} = \prod_{\sigma \in \Xi} \tilde{U}_{\sigma} = \sum_{\sum_s q_s = Q_{\sigma}} \prod_{s \in \sigma} \binom{g_s}{q_s} \cdot \tilde{X}_s^{q_s}, \quad \tilde{X}_s = w_s(\rho, T, \mathbf{N}) e^{-\beta \varepsilon_s}.$$

$$w_s(\rho, T, \mathbf{N}) = \int_0^{\mathcal{F}_s^{(cr)}} P(\Gamma, \mathcal{F}) d\mathcal{F} - \text{вероятность существования одноэлектронного состояния иона при учете возмущения плазменным микрополем, определяемая как вероятность того, что напряжённость плазменного микрополя } \mathcal{F} \text{ не превзойдет критической величины } \mathcal{F}_{cr};$$

$P(\Gamma, \mathcal{F})$ – функция распределения напряжённости ионных микрополей, зависящая от параметра неидеальности плазмы.

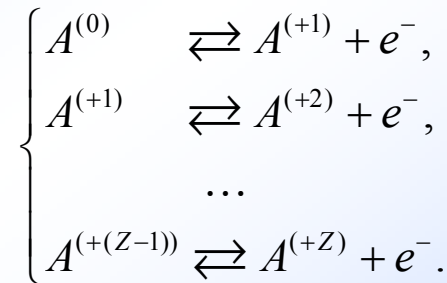
D.G. Hummer, D. Mihalas. Ap. J., **331**, 794 (1988);

A. Nayfonov, W. Dappen, D. Hummer, D. Mihalas, Ap. J., **526**, 451 (1999).

Уравнения ионизационного равновесия:

Равновесный состав плазмы $\mathbf{N} \equiv \{N_Q, N_e\}$, соответствующий $\min[F(\rho, T, \mathbf{N})]$, находится из решения системы нелинейных уравнений ионизационного равновесия (совместно с условиями электронейтральности и сохранением числа ядер в системе), соответствующих процессам ионизации/рекомбинации:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{c_Q}{c_{Q-1}} = \frac{\tilde{U}_Q}{\tilde{U}_{Q-1}} \cdot \exp\left[\beta(\mu_e - \Delta\mu_Q)\right], \\ \langle Z \rangle = \frac{4}{\sqrt{\pi} \rho N \lambda_e^3} I_{1/2}(\beta\mu_e), \\ \sum_Q (Z - Q)c_Q = \langle Z \rangle, \quad \sum_Q c_Q = 1. \end{array} \right.$$



$$\begin{aligned} \Delta\mu_Q = & \left(\frac{\partial}{\partial N_Q} - \frac{\partial}{\partial N_{Q-1}} - \frac{\partial}{\partial N_e} \right) \Delta F - \\ & - k_B T \sum_{Q'} \left(\frac{\partial}{\partial N_Q} - \frac{\partial}{\partial N_{Q-1}} - \frac{\partial}{\partial N_e} \right) \ln \tilde{U}_{Q'}, \\ \Delta F(\rho, T, \mathbf{N}) = & \Delta F_c + \Delta F_{HS}. \end{aligned}$$

Уравнения состояния неидеальной плазмы:

$$P(\rho, T, N) \equiv - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, N} = P_i^{(id)} + P_e^{(id)} + P_b + \Delta P,$$

$$E(\rho, T, N) \equiv -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right)_{V, N} = E_i^{(id)} + E_e^{(id)} + E_{ioniz} + E_b + \Delta E.$$

■ Идеально-газовые вклады ионов и свободных электронов:

$$P_i^{(id)} = \rho N k_B T, \quad P_e^{(id)} = k_B T \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \frac{I_{3/2}(\beta\mu_e)}{\lambda_e^3}, \quad E_i^{(id)} = \frac{3}{2} N k_B T, \quad E_e^{(id)} = k_B T \frac{4}{\sqrt{\pi} \rho} \frac{I_{3/2}(\beta\mu_e)}{\lambda_e^3}.$$

■ Энергозатраты на ионизацию ионов:

$$E_{ioniz} = \sum_Q N_Q (1 - \delta_{Q,Z}) \sum_{k=0, Q < Z-1}^{Z-Q-1} I_k. \quad (\text{относительно системы изолированных атомов при } T=0)$$

■ Вклад связанных электронов:

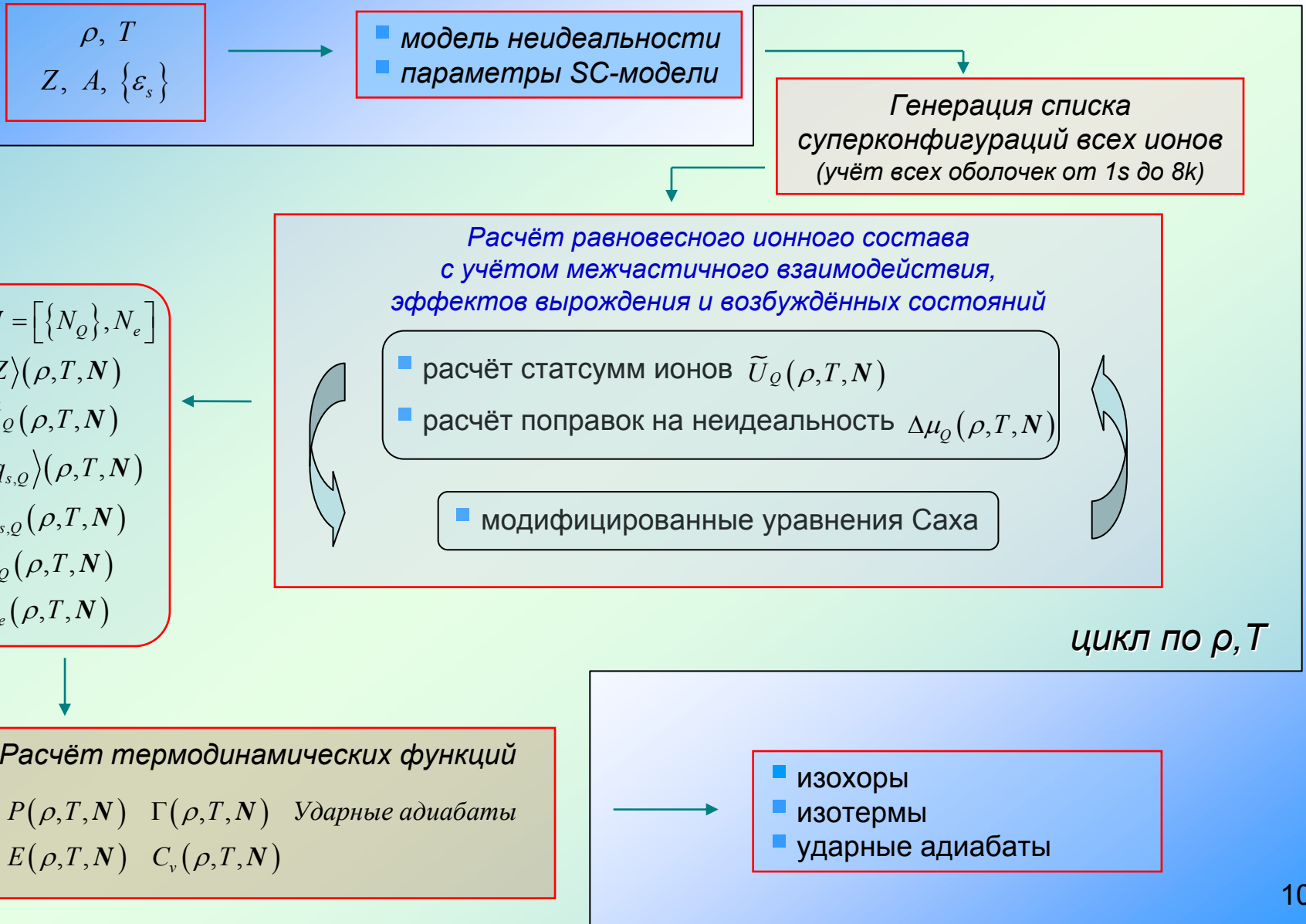
$$P_b = k_B T \sum_Q N_Q \frac{\partial \ln \tilde{U}_Q}{\partial V}, \quad E_b = k_B T^2 \cdot \sum_Q N_Q \frac{\partial \ln \tilde{U}_Q}{\partial T}.$$

■ Учёт кулоновского взаимодействия и эффектов собственных объёмов ионов:

$$\Delta P_c = \frac{\Delta E_c}{3V}, \quad \Delta E_c = N k_B T \sum_Q c_Q \varepsilon_{OCP}(\Gamma_z), \quad \text{где} \quad \varepsilon_{OCP}(\Gamma) = \Gamma^{3/2} \left[\frac{A_1}{\sqrt{\Gamma + A_2}} + \frac{A_3}{\Gamma + 1} \right] + \frac{B_1 \Gamma^2}{\Gamma + B_2} + \frac{B_3 \Gamma^2}{\Gamma^2 + B_4},$$

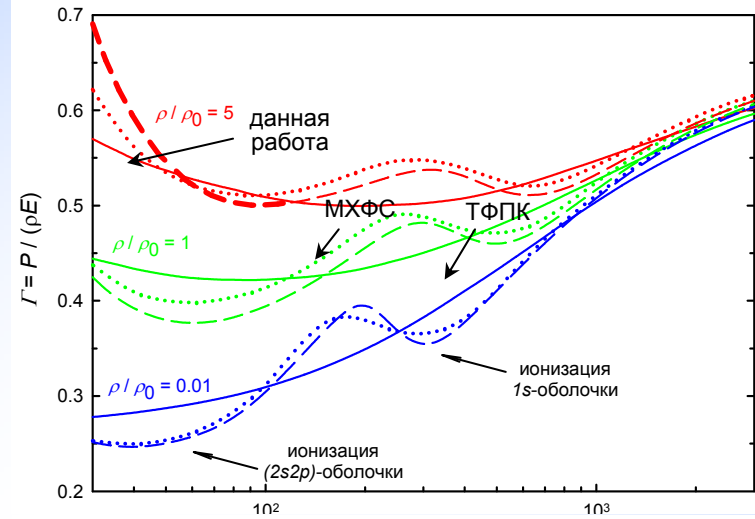
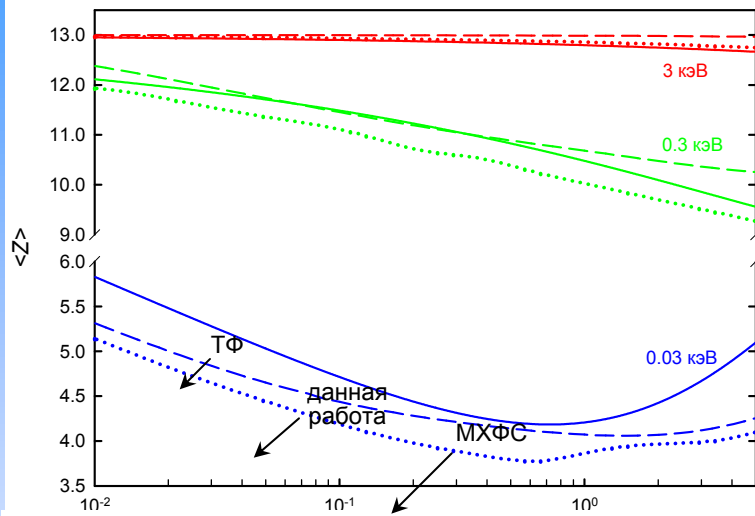
$$\Delta P_{HS} = \rho N k_B T \eta \cdot \left(\frac{4 - 2\eta}{(1 - \eta)^3} \right), \quad \Delta E_{HS} = -N k_B T^2 \cdot \left(\frac{4 - 2\eta}{(1 - \eta)^3} \right) \cdot \frac{\partial \eta}{\partial T}.$$

Исследовательский численный алгоритм

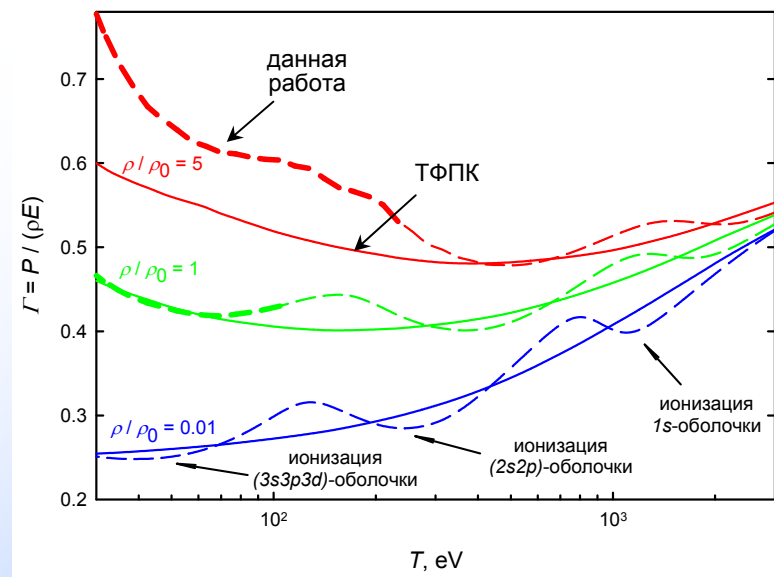
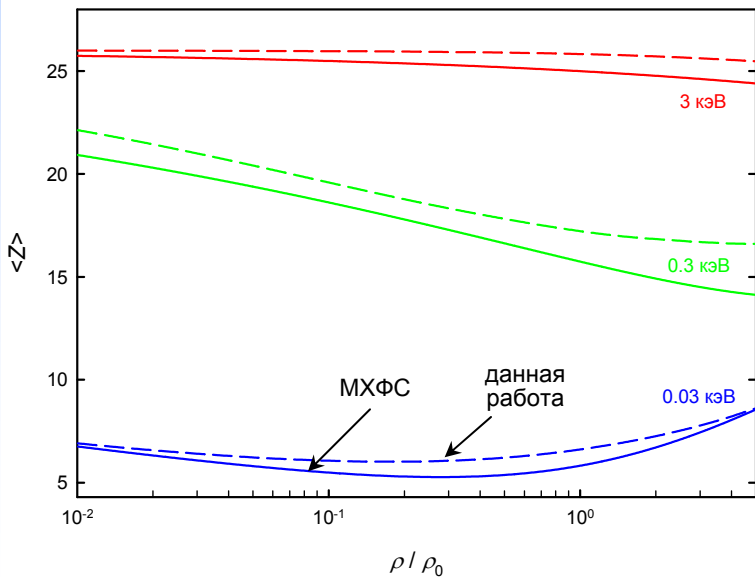


Результаты: степень ионизации $\langle Z \rangle$ и параметр Грюнайзена Γ

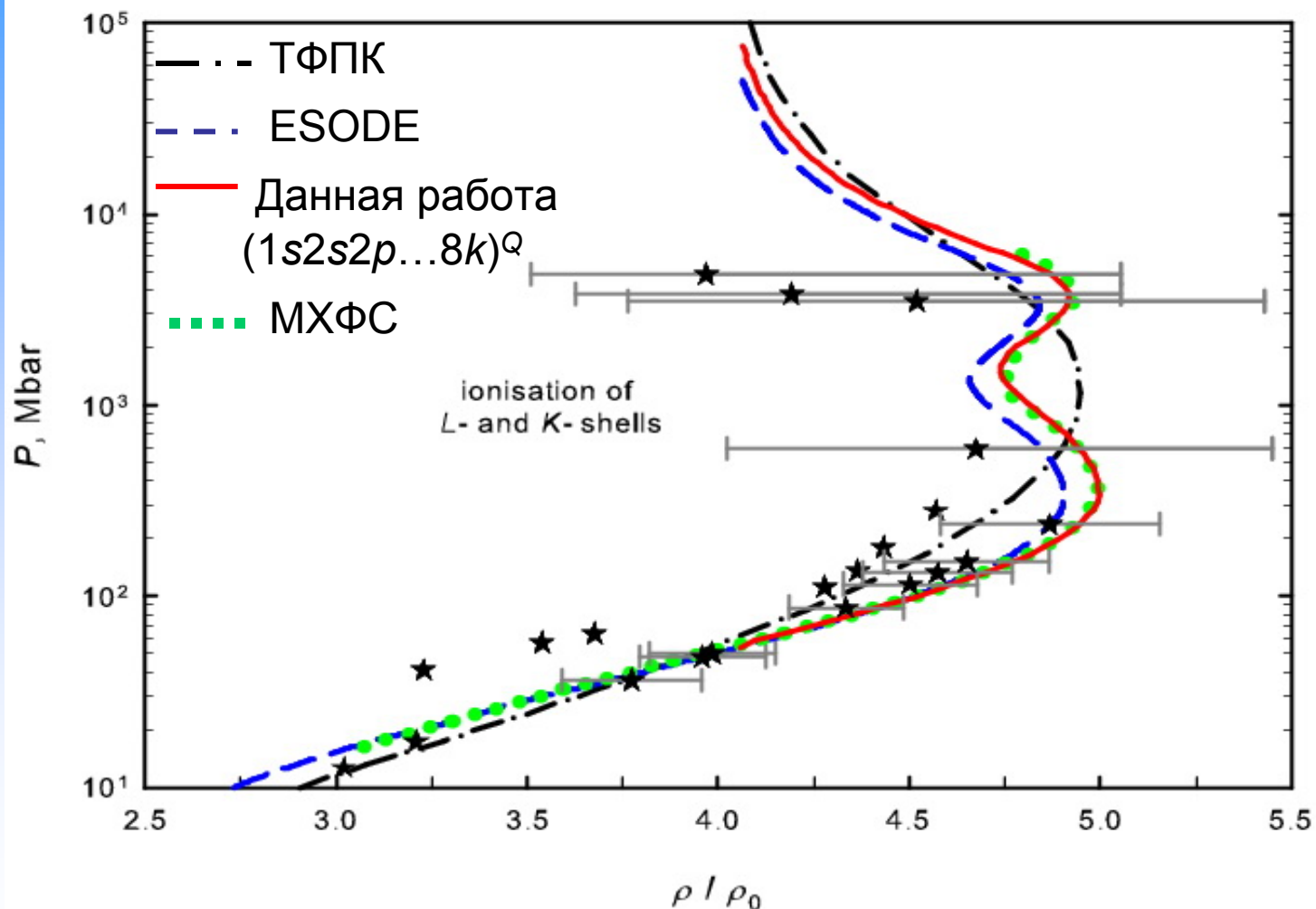
Al



Fe



Результаты: ударная адиабата сплошного Al



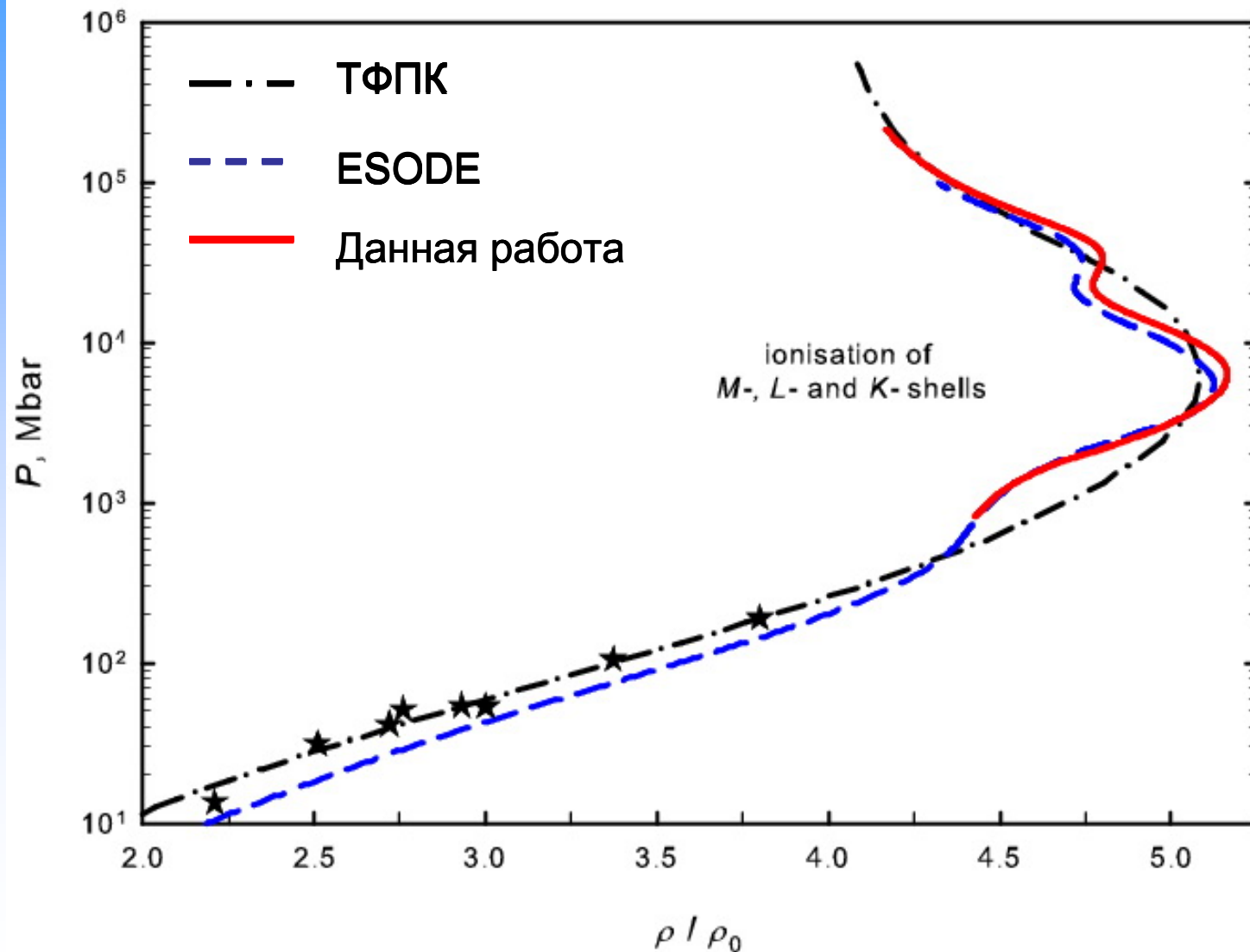
Н.Н. Калиткин, Л.В. Кузьмина. Препринт ИПМ № 35 (1975); В.П. Копышев. ЧМСС, **8**, 54 (1977).

А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков, С.К. Труханов, В.Б. Уваров, ВАНТ, сер. Методики и программы ..., **3**, 62 (1990). 12

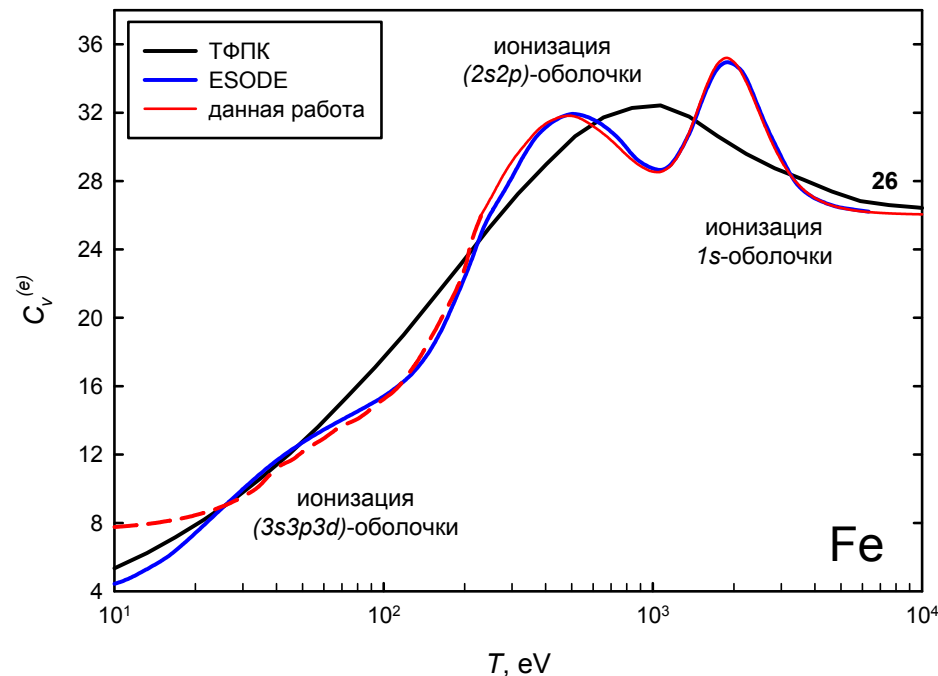
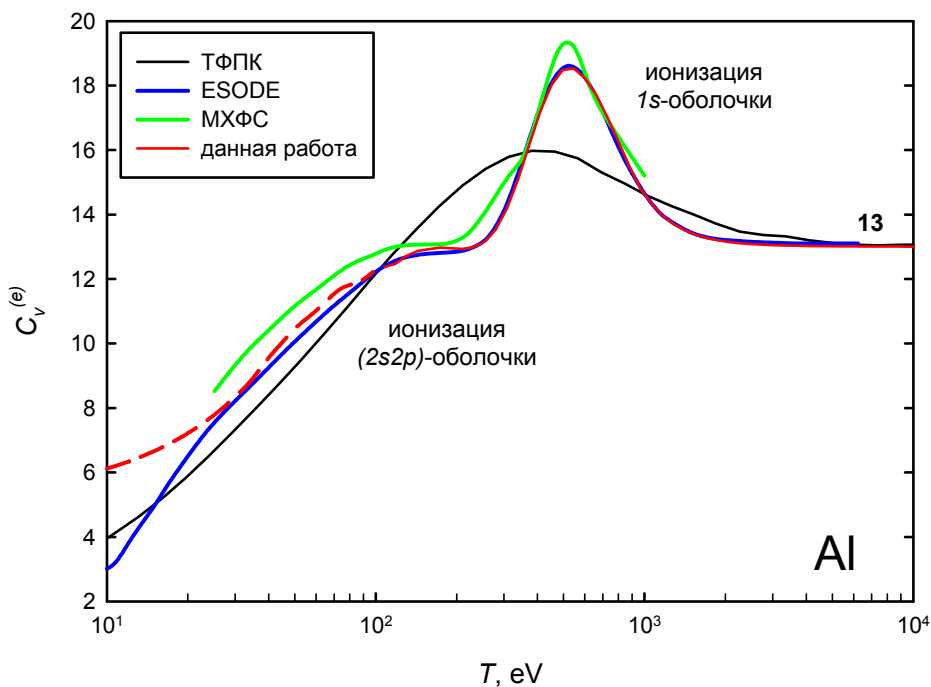
J.C. Pain. Contrib. Plasma Phys., **47**, 6, 421 (2007).

А.А. Shadrin, P.A. Loboda, V.V. Popova. 30th ECLIM Conf., August 31 – September 5, 2008, Darmstadt, Germany.

Результаты: ударная адиабата сплошного Fe



Результаты: электронная теплоемкость вдоль ударных адиабат сплошных Al и Fe



$$C_v^{(e)} = \frac{1}{3Nk_B/2} \frac{\partial [E(\rho, T) - E_i(\rho, T)]}{\partial T}$$

Дальнейшее развитие модели

Модель межчастичного взаимодействия

- Моделирование кулоновской взаимодействия на основе гиперцепного приближения, реализующего формализм корреляционных функций и межчастичных псевдопотенциалов, через которые выражаются поправки на кулоновское взаимодействие (K. Wünsch, et al. *Structure of strongly coupled multicomponent plasmas*. Phys. Rev. E, **77**, 056404 (2008)).
- Моделирование эффектов собственных объёмов ионов непосредственно по многокомпонентной модели «твёрдых» сфер (G.A. Mansoori, et al., *J. Chem. Phys.*, **54**, 1523 (1971)).

Суперконфигурационная модель

- Уточнение модели расчёта вероятностей заселения одноэлектронных состояний.
- Учёт поправок 1-го порядка к энергиям конфигураций (межэлектронное взаимодействие) при расчёте статсумм по SC-модели.
- Реализация гибкого разбиения атомных оболочек на супероболочки по температурному критерию.

Численная методика

- Реализация устойчивого «гибридного» численного алгоритма расчёта равновесного ионного состава с применением т.н. генетического алгоритма.

D.E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley, ISBN 0-201-15767-5 (1989).