

## ФИЗИКА ГАЗОВОГО РАЗРЯДА И ПЛАЗМЫ

УДК 533.9,621.039,533.9:51-73,517.958:536

# РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ ПЛАЗМЫ АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СИСТЕМ С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ ЭНЕРГИИ

© 2015 г. В. В. Шумаев

Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана

E-mail: shumaev@student.bmstu.ru

Поступила в редакцию 15.07.2015 г.

Представлены результаты расчета степени ионизации, давления и удельной внутренней энергии плазмы алюминия в широком диапазоне температур. Для температур  $T > 10^5$  К применен вычислительный код ТЕРМАГ, который основан на модели Томаса–Ферми, для более низких температур использована модель ионизационного равновесия (модель Саха). В области совместной применимости обе модели показывают количественно сходные результаты, что позволяет говорить о возможности сшивки их результатов для построения широкодиапазонного уравнения состояния вещества.

*Ключевые слова:* термодинамические функции, модель Томаса–Ферми, модель Саха, уравнения Саха–Больцмана, алюминий, горячая плазма, энергетические установки, уравнение состояния.

DOI: 10.1134/S2079562915030082

### ВВЕДЕНИЕ

Существующие и проектируемые энергетические системы, которые характеризуются высокой плотностью энергии, в частности, установки магнитно-инерциального термоядерного синтеза могут использоваться для широкого круга задач: как источники частиц для уничтожения радиоактивных отходов и медицинского применения, как составная часть реактора синтез-деление, для материаловедческих экспериментов [1–5]. Важной особенностью этих систем является сверхвысокое магнитное поле ( $\sim 10^4$  Тл в момент максимального сжатия мишени) [6, 7].

Важными условиями работы энергетических установок, в которых для воздействия на термоядерную мишень применяются мощные плазменные источники, излучение рентгеновского диапазона спектра и магнитоускоренные потоки плотной плазмы, являются изоляция и удержание плазмы в центральной области установки, стабилизация возможных плазменных неустойчивостей, быстро нарастающих с течением времени.

При этом физические свойства высокотемпературной плазмы этих установок определяются, в том числе, уравнением состояния вещества, транспортными и оптическими свойствами неидеальной плазмы. Таким образом, возникает необходимость в рассмотрении плазмодинамических процессов в совокупности с уравнениями состояния

вещества на различных стадиях сжатия мишени, в том числе и при большой плотности (сжатие мишени инерциального термоядерного синтеза), т.е. для широкого диапазона плотностей и температур (температуры от нескольких тысяч до ста миллионов градусов Кельвина, плотности от характерных значений для газов до  $10^4$  г/см<sup>3</sup>) [1–5].

Существует проблема построения широкодиапазонных уравнений состояния вещества. В данной работе эта проблема решается простейшим способом: термодинамические функции получают на основе модели ионизационного равновесия (модели Саха) [8–10] и квантово-статистической модели (модели Томаса–Ферми) [9–18]. На границах применимости этих моделей предлагается выполнять “сшивку” термодинамических функций. Данные модели являются сравнительно простыми и удобными для “сшивки”, так как каждая из них продолжает давать качественно разумные результаты далеко за границами своей области применимости [10].

Под уравнением состояния вещества мы будем понимать функциональную зависимость от температуры  $T$  и плотности  $\rho$  следующих термодинамических величин: давления  $P(T, \rho)$ , удельной внутренней энергии  $E(T, \rho)$ , удельной энтропии  $S(T, \rho)$ .

В работах [9, 19–22] выполнена физическая и математическая постановка задачи об определении

степени ионизации и термодинамических функций неидеальной плазмы средствами моделей Саха и Томаса–Ферми. Авторами работ [9, 19–22] разработан вычислительный код ТЕРМАГ (определение ТЕРмодинамических свойств смеси веществ в МАГнитном поле на основе модели Томаса–Ферми) [24], который дает достоверные результаты при температурах больше  $10^5$  К [9, 22]. Заметим, что квантовые и обменные поправки позволяют расширить область применимости данной модели до температур  $(2–4.5) \cdot 10^4$  К при любых плотностях [22]. Модель Саха можно использовать в дополнение к модели Томаса–Ферми для расширения границ применимости последней в области низких температур и плотностей. В свою очередь границы применимости модели Саха обусловлены проявлением эффектов сильной неидеальности плазмы со стороны плотностей  $\rho \sim 10^{-3}$  г/см<sup>3</sup> и температур  $T \sim 10^4$  К, а также эффектов нарушения локального ионизационного равновесия при плотностях  $\rho \sim 10^{-7}$  г/см<sup>3</sup> и температурах  $T \leq 10^5$  К [25], что не позволяет использовать только ее для описания термодинамики ионизованных газов. Однако границы применимости модели Саха можно расширить в сторону больших плотностей, учитывая поправки на неидеальность плазмы [10].

Ранее [21–24] было проанализировано поведение моделей Саха и Томаса–Ферми в переходной области параметров  $10^4$  К  $< T < 10^6$  К,  $10^{-7} < \rho < 10^{-1}$  г/см<sup>3</sup> [23, 24]. Установлено, что при температуре  $T \sim 10^5$  К обе модели показывают сходные результаты, однако при низких температурах наблюдается значительное расхождение в результатах. Это объясняется попаданием модели Томаса–Ферми в область своей плохой применимости, а увеличение относительной погрешности в диапазоне  $3 \cdot 10^5–10^6$  К связано со снижением точности модели Саха, которая подходит к границе своей применимости [25].

Отметим, что в работе [10] область применимости модели Томаса–Ферми определялась по амплитуде колебаний ионных остовов. При достижении амплитудой радиуса атомной ячейки данная модель теряет свою применимость. В то же время граница применимости модели Саха следующая: суммарный объем ионных остовов  $v^*$  должен быть существенно (в 10–100 раз) меньше полного объема  $v$  атомной ячейки.

### МОДЕЛЬ САХА

Для расчета состава однокомпонентной плазмы и определения степени ионизации  $\bar{Z}$  решается система уравнений Саха–Больцмана (1) с учетом

неидеальности (3), условий нормировки и квазинейтральности (4) [25]:

$$\frac{n_{m+1}n_e}{n_m} = 2 \frac{\Sigma_{m+1}}{\Sigma_m} \left( \frac{2\pi m_e k T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{I_{m+1}^*}{kT}\right), \quad (1)$$

$$m = 0, 1 \dots Z - 1.$$

$$\Sigma_m = g_{z0} + g_{z1} \exp\left(-\frac{w_{z1}}{kT}\right) + g_{z2} \exp\left(-\frac{w_{z2}}{kT}\right) + \dots, \quad (2)$$

$$I_{m+1}^* = I_{m+1} - \Delta I_{m+1} = I_{m+1} - \frac{(m+1)e^2}{r_D}, \quad (3)$$

$$r_D = \sqrt{\frac{kT}{n_e e^2}}.$$

$$\sum_m n_m = n_0, \quad \sum_m m n_m = n_e, \quad \bar{Z} = \frac{n_e}{n_0}, \quad (4)$$

где  $n_{m+1}$ ,  $n_m$  – концентрация ионов с зарядом  $m+1$  и  $m$  соответственно,  $n_e$  – концентрация электронов,  $\Sigma_m$ ,  $\Sigma_{m+1}$  – статистические суммы (статсуммы),  $m_e$  – масса электрона,  $k$  – постоянная Больцмана,  $h$  – постоянная Планка,  $I_{m+1}^*$ ,  $I_{m+1}$  – энергия ионизации с кулоновской поправкой и без нее,  $Z$  – зарядовое число ( $Z = 13$  для алюминия),  $g_{z0}$ ,  $g_{zi}$  – статвес основного и возбужденного энергетических состояний, соответственно,  $w_{zi}$  – энергия электронного возбуждения,  $\Delta I_{m+1}$  – поправка к энергии ионизации,  $e$  – заряд электрона,  $r_D$  – радиус Дебая,  $n_0$  – концентрация атомов и ионов.

При этом производится “обрезание” статистических сумм (2), т.е. предлагается проводить расчет статсумм до уровня с энергией ионизации, не превышающей  $kT$  [25].

Полное (сумма давления электронов  $P_e$  и ионов  $P_i$ ) давление плазмы вычисляется как сумма парциальных давлений атомов и электронов [9]:

$$P = P_e + P_i = N\rho(1 + \bar{Z})kT, \quad (5)$$

где  $N$  – число атомов.

Удельная внутренняя энергия плазмы представляется, как сумма внутренних энергий атомов и электронов с учетом энергии ионизации и электронного возбуждения:

$$E = \frac{3}{2} N(1 + \bar{Z})kT + N \sum_m Q_m \alpha_m + N \sum_m W_m \alpha_m, \quad (6)$$

где  $Q_m$  – энергия, необходимая для того, чтобы оторвать от атома  $m$  электронов,  $\alpha_m$  – концентрация ионов с зарядом, равным  $m$ ,  $W_m$  – энергия электронного возбуждения.

МОДЕЛЬ ТОМАСА–ФЕРМИ

В модели Томаса–Ферми плазма считается состоящей из ядер и электронов. Ядра подчиняются статистике Больцмана и вносят свой вклад в уравнения состояния. Электроны рассматриваются как газ, находящийся в самосогласованном электростатическом поле  $V(r)$ . Они подчиняются статистике Ферми–Дирака.

Электростатический потенциал  $V(r)$  удовлетворяет сферически-симметричному уравнению Пуассона [9]:

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(rV) = \frac{2}{\pi} (2\theta)^2 I_{1/2} \left( \frac{V(r) + \mu}{\theta} \right) \quad (0 < r < r_0). \quad (7)$$

Граничные условия:

$$V(r) = Ze/r \quad \text{при } r \rightarrow 0, \quad (8)$$

$$\left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = 0 \quad \text{при } r \rightarrow r_0, \quad (9)$$

где  $\theta = kT$ ,  $\mu$  – химический потенциал,  $I_{1/2}(x) = \int_0^x \frac{y^2 dy}{1 + \exp(y - x)}$  – функция Ферми–Дирака, где  $y = p^2/\theta$ ,  $p$  – импульс электрона,  $Z, e$  – заряд ядра и электрона соответственно,  $r_0$  – радиус атомной ячейки.

При вычислении термодинамических функций предполагается, что потенциал Томаса–Ферми рассчитан. Тогда давление электронов на границе атомной ячейки может быть вычислено, как средний импульс, переносимый ими за единицу времени через единицу поверхности атомной ячейки радиуса  $r_0$  [9]:

$$P_e = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dp \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \times \frac{p^2 \sin \vartheta p^2 \cos^2 \vartheta}{1 + \exp\left(\frac{p^2}{2\theta} + \eta\right)} = \frac{(2\theta)^2}{6\pi^2} I_{3/2}(-\eta), \quad (10)$$

где  $\vartheta$  и  $\varphi$  – углы в сферических координатах,  $\eta = -\mu/\theta$ . Для нахождения полного давления частиц, находящихся в атомной ячейке, необходимо учитывать давление создаваемое ядрами. При высоких температурах газ, состоящий из ядер, обычно рассматривают, как идеальный газ. Поэтому для полного давления  $P$ , ГПа имеем:

$$P = 2.942 \cdot 10^4 \left( P_e + \frac{\theta}{v} \right), \quad (11)$$

Методика вычисления удельной внутренней энергии и энтропии плазмы приведена в [9, 22].

ТЕСТОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПО МОДЕЛИ САХА

Сочетание физических, механических и химических свойств алюминия и его сплавов определяет широкое применение этого металла практически во всех областях техники [26]. При этом алюминий является веществом “удобным” для проведения расчетов на основе модели Саха: обладает малым зарядовым числом  $Z$ , для него хорошо выполняется приближение Рассела–Саундерса [8], в литературе имеются все необходимые для нахождения уравнения состояния вещества данные (параметры энергетических уровней и энергии возбуждения [27]).

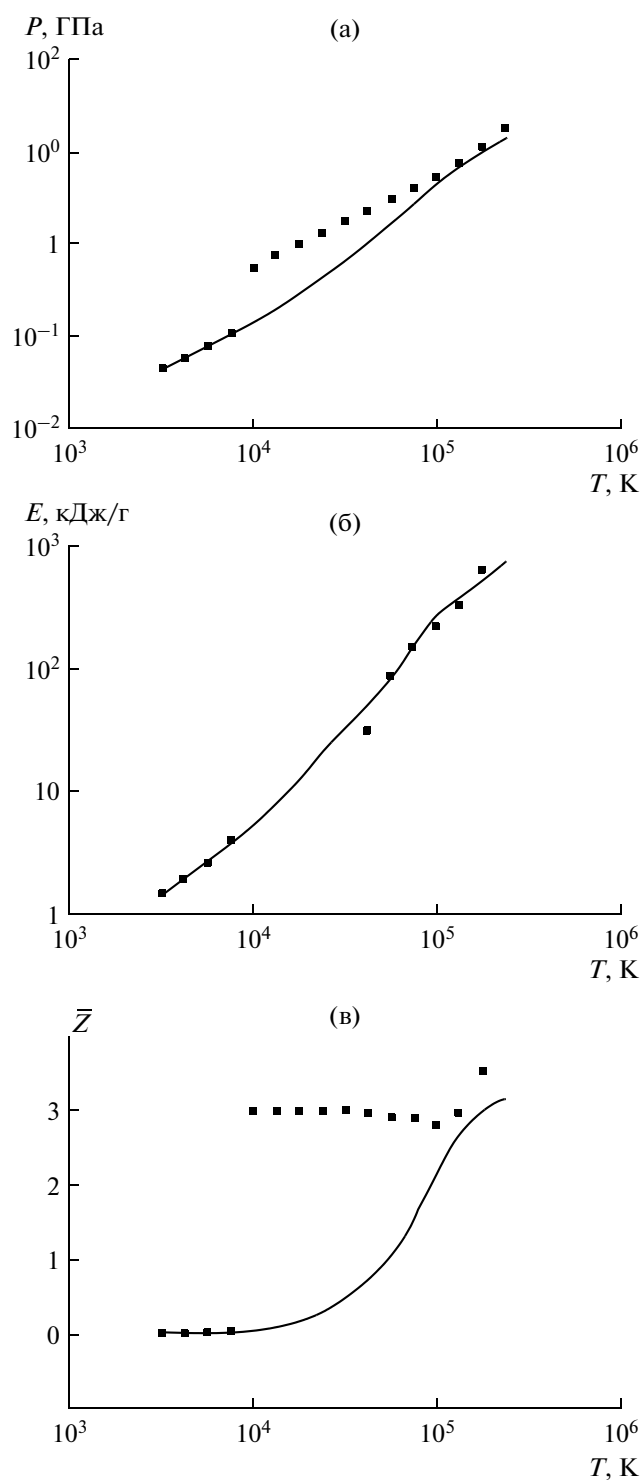
Термодинамические функции (давление, удельная внутренняя энергия) и степень ионизации плазмы алюминия в зависимости от температуры показаны на рис. 1. Здесь также выполнено сопоставление полученных с помощью расчетов результатов с известными из литературы данными [28].

Из приведенных графиков можно сделать вывод о том, что результаты соотносятся как качественно, так и количественно. Можно выделить две области хорошего соответствия результатов:  $T < 10^4$  К,  $T \sim 10^5$  К. Вероятной причиной несоответствия в диапазоне  $10^4 < T < 10^5$  является отсутствие физически обоснованного скачка степени ионизации. Различия в результатах могут быть объяснены разными методиками обрезания статсумм и снижения потенциалов ионизации и учетом поправок на неидеальность к термодинамическим функциям [29].

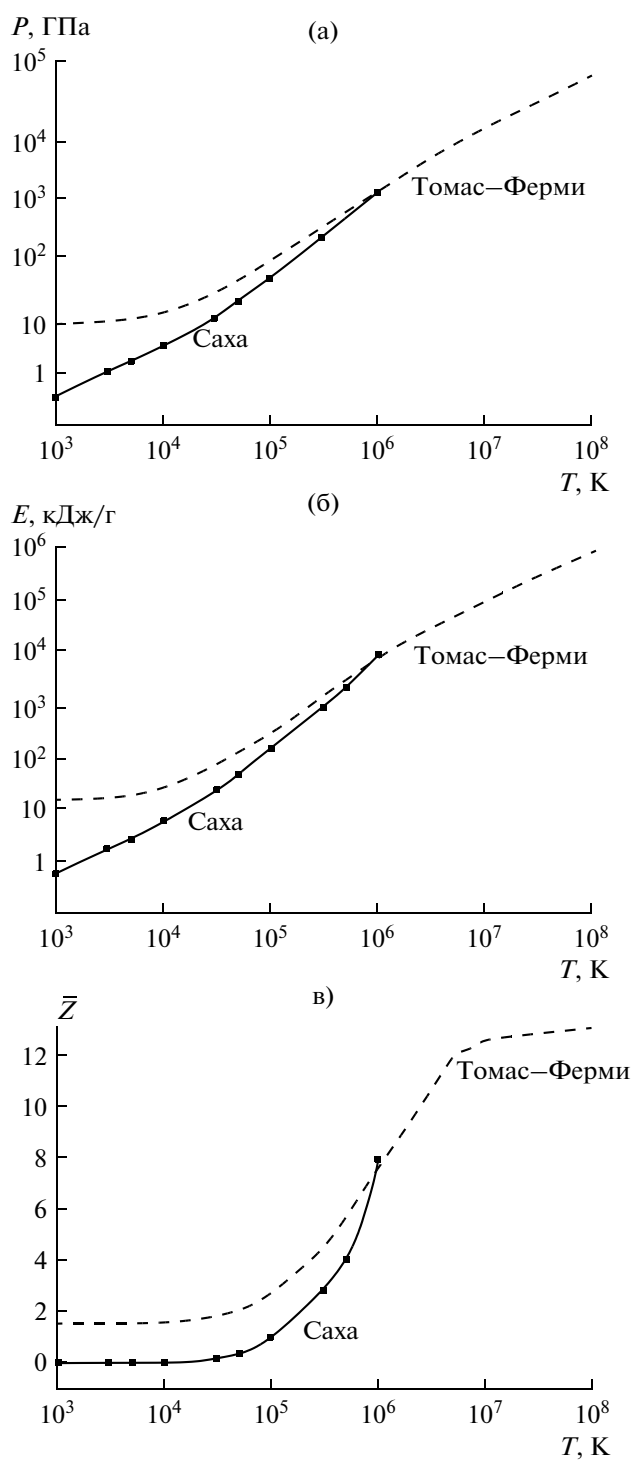
Следует отметить, что точность данных [28] в представленном диапазоне параметров не гарантирована, поскольку отсутствуют эксперименты по исследованию термодинамических свойств сильно неидеальной алюминиевой плазмы и плазмы других веществ. К тому же среди данных имеется несколько точек с отрицательной внутренней энергией [28]. Расчет термодинамических функций при высоких температурах с помощью модели Саха не проводился, так как при  $T \sim 10^5$  К достаточно хорошо работает модель Томаса–Ферми.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ПО МОДЕЛЯМ САХА И ТОМАСА–ФЕРМИ

На рис. 2 представлены зависимости от температуры давления  $P$ , удельной внутренней энергии  $E$  и степени ионизации  $\bar{Z}$  плазмы алюминия для плотности  $1 \text{ г/см}^3$ , рассчитанные авторами по моделям Саха и Томаса–Ферми. Отличия между термодинамическими функциями, рассчитанными на основе данных моделей, при температурах  $T < 10^6$  К объясняются попаданием модели Томаса–Ферми в область своей плохой применимости



**Рис. 1.** Давление (а), удельная внутренняя энергия (б) и степень ионизации (в) плазмы алюминия с плотностью  $\rho = 4.47 \times 10^{-2} \text{ г/см}^3$  в зависимости от температуры  $T$ , рассчитанные по модели Саха. Квадратами обозначены данные [28].



**Рис. 2.** Давление (а), удельная внутренняя энергия (б) и степень ионизации (в) плазмы алюминия с плотностью  $1 \text{ г/см}^3$  в зависимости от температуры  $T$ , рассчитанные по моделям Саха (сплошная линия) и Томаса–Ферми (пунктирная линия).

[22–24], то есть модель Томаса–Ферми не описывает ионизацию при сравнительно низких температурах.

Заметим, что вне области своей применимости модель Томаса–Ферми показывает результаты того же порядка величины, что и модель Саха. Как отмечено в [10], свойства моделей Саха и Томаса–Ферми таковы, что они дают качественно верные результаты вне области своей применимости.

Из рис. 2 следует, что при температурах  $T \sim 10^6$  К обе модели показывают количественно сходные результаты, что позволяет говорить о возможности сшивки их результатов для построения широкогодиапазонного уравнения состояния вещества.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненная работа иллюстрирует результаты расчетов давления  $P$ , удельной внутренней энергии  $E$  и степени ионизации  $\bar{Z}$  плазмы алюминия на основе квантово-статистической модели (модели Томаса–Ферми) и модели ионизационного равновесия (модели Саха). Представленные расчеты проведены с помощью вычислительного кода для определения термодинамических свойств смеси веществ в магнитном поле на основе модели Томаса–Ферми (вычислительного кода ТЕРМАГ) и численного решения системы уравнений Саха–Больцмана. Термодинамические функции при температурах  $T > 10^6$  К рассчитаны по более простой модели Томаса–Ферми, так как она уже работает хорошо при таких температурах.

Полученные данные показывают, что результаты расчетов по моделям хорошо соотносятся при температурах  $T \sim 10^5$  К. Известно, что точность модели Томаса–Ферми увеличивается с ростом температуры. Разница между результатами расчетов при  $T \sim (10^3\text{--}10^4)$  К неприемлемо большая. Это связано с тем, что термодинамические функции, полученные с помощью модели Томаса–Ферми, являются неточными в этом диапазоне температур. Приведенные результаты планируется использовать для сшивки данных моделей и построения широкогодиапазонных уравнений состояния вещества.

Результаты исследования получены в рамках выполнения государственного задания Министерством образования и науки Российской Федерации № 13.79.2014/К.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Ryzhkov S.V. // Bull. Rus. Acad. Sci. Phys. 2014. V. 78. No. 5. PP. 456–461.
2. Esaulov A.A., Sasorov P.V. // Plasma. Phys. Rep. 1997. V. 23. PP. 576–586.
3. Chirkov A.Yu., Ryzhkov S.V. // J. Fusion Energy. 2012. V. 31. No. 1. PP. 7–12.
4. Kostyukov I.Yu., Ryzhkov S.V. // Plasma. Phys. Rep. 2011. V. 37. No. 13. PP. 1092–1098.
5. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. // Probl. At. Sci. Tech. 2013. No. 1(83). PP. 12–14.
6. Gotchev O.V., Chang P.Y., Knauer J.P. et al. // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 103. P. 215004.
7. Nakamura D., Sawabe H., Takeyama S. // Rev. Sci. Instrum. 2014. V. 85. P. 036102.
8. Frank-Kamenetskii D.A. // Lektsii po fizike plazmy. (Lectures on Plasma Physics). 1968. Moscow: Atomizdat [in Russian].
9. Nikiforov A.F., Novikov V.G., Uvarov V.B. // Quantum-Statistical Models of Hot Dense Matter. Methods for Computation Opacity and Equation of State. 2005. Basel: Birkhauser Verlag.
10. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Shumaev V.V. // High Temperature Material Processes: An International Quarterly of High-Technology Plasma Processes. 2014. V. 18. Nos. 1–2. PP. 99–109.
11. Liu C., Zhu S. // J. Comput. Appl. Math. 2015. V. 282. PP. 251–261
12. Aftalion A., Noris B., Sourdis C. // Commun. Math. Phys. 2015. V. 336. No. 2. PP. 509–579.
13. Stanton L.G., Murillo M.S. // Phys. Rev. E. 2015. V. 91. No. 3. P. 033104.
14. Ribeiro R.F., Lee D., Cangini A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2015. V. 114. No. 5. P. 050401.
15. Malomed B.A., Pelinovsky D.E. // Appl. Math. Lett. 2015. V. 40. PP. 45–48.
16. Belvedere R., Rueda J.A., Ruffini R. // Astrophys. J. 2015. V. 799. No. 1. P. 23.
17. Rusek M., Lagadec H., Blenski T. // Phys. Rev. A. 2000. V. 63. P. 013203.
18. Ying R., Kalman G. // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. PP. 3927–3950.
19. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Shumaev V.V. // Prikladnaya fizika. 2014. No. 3. PP. 22–25.
20. Kalitkin N.N., Kozlitin I.A. // Mathematical Models and Computer Simulations. 2009. V. 1. No. 2. PP. 200–207.
21. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Shumaev V.V. // Probl. At. Sci. Tech. 2015. No. 1(95). PP. 97–99.
22. Dyachkov S., Levashov P. // Phys. Plasmas. 2014. V. 21. No. 5. P. 052702.
23. Kuzenov V.V., Shumaev V.V. // Prikladnaya fizika. 2015. No. 2. PP. 32–36.
24. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V., Shumaev V.V. // Probl. At. Sci. Tech. 2015. No. 4(98). PP. 53–56.
25. Boyko Yu.V., Grishin Yu.M., Kamrukov A.S., Kozlov N.P., Chuvashov S.N., and Protasov Yu.S. // Thermodynamic and Optical Properties of Ionized Gases at Temperatures to 100 eV. 1991. New York: Hemisphere.
26. Bhattacharyya S., Saha J.K., Mukherjee T.K. // Phys. Rev. A. 2015. V. 91. No. 4. P. 042515.
27. Moore C.E. // Atomic Energy Levels. National Bureau of Standards. 1949. V. 1.
28. Kalitkin N.N., Kuzmina L.V., Rogov V.S. // Tablitsy termodinamicheskikh funktsiy i transportnykh koeffitsiyentov plazmy. (Tables of Thermodynamic Function and Transport Coefficients of Plasma). 1972. Moscow: IPM AN SSSR.
29. Fortov V.E., Iakubov I.T. The Physics of Non-Ideal Plasma. 1999. Singapore: World Scientific.

## Calculation of Thermodynamic Functions of an Aluminum Plasma for High-Energy-Density Systems

V. V. Shumaev

*Bauman Moscow State Technical University, Vtoraya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russia*

*e-mail: shumaev@student.bmstu.ru*

Received July 15, 2015

**Abstract**—The pressure, specific internal energy, and degree of ionization of an aluminum plasma have been calculated in a wide range of temperature. The computational code TERMAG based on the Thomas–Fermi model has been used for the temperatures  $T > 10^5$  K. The ionization equilibrium model (Saha model) has been used for lower temperatures. Quantitatively similar results have been obtained in the limits of applicability of the Thomas–Fermi and Saha models. They can be assembled into a wide-range equation of states.

*Keywords:* thermodynamic functions, Thomas–Fermi model, Saha model, Saha–Boltzmann equations, aluminum, hot plasma, power engineering equipment, equation of state