Уравнение состояния плазмы с учетом объема ионных остовов

Калиткин Н.Н., Козлитин И.А.

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, Россия

***Введение.*** Уравнение состояния газовой плазмы можно описать моделью ионизационного равновесия (модель Саха). Высокую точность модели обеспечивает использование экспериментально измеренных потенциалов ионизации. Однако при сверхвысоких плотностях плазма переходит в жидкое состояние. При этом возникают следующие вопросы: каков вклад взаимодействия заряженных частиц и как учесть неточечность ионных остовов.

***Взаимодействие зарядов*** много лет вызывает дискуссии. Высказывались предположения о плазменных фазовых переходах, но эксперименты их не обнаружили. На самом деле следует учесть, что в плазме возникает микроскопическое флуктуирующее электрическое поле, обусловленное хаотическим тепловым движением зарядов. Электрическое поле имеет положительную энергию, которая компенсирует отрицательную энергию взаимодействия зарядов. Поэтому плазма остается идеальной даже при сверхвысоких плотностях.

***Учет ионных остовов.*** Объем -кратного ионного остова  можно выразить через потенциал -й ионизации. Это позволяет ввести объемы ионных остовов в функционал свободной энергии . При этом в классическом функционале надо заменить объем атомной ячейки  на , где  есть суммарный объем всех остовов ( — доля -кратных ионов). Свободные электроны предполагаются не классическими, а частично вырожденными.

***Расчеты*** по предложенной модели проводились для многоэлектронных атомов. Оказалось, что область применимости модели Саха при этом кардинально расширилась. Модель стала давать физически разумные результаты даже при сверхвысоких плотностях и низких температурах, где плазма перешла из газового состояния в жидкое. Ранее в этой области использовалась модель Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками (ТФП). Теперь термодинамические функции модели Саха сильно сблизились с моделью ТФП.

Примером такого сближения являются изотермы степени ионизации  или давления  при . Пока объем ионной ячейки  больше  – объема нейтрального атома, модель дает , . При  появляются ненулевые  и , монотонно возрастающие при убывании . Таким образом, модель Саха с неточечными ионами описывает явление холодной ионизации сжатием. При этом сами зависимости  и  оказываются близкими к соответствующим кривым модели ТФП.

***Склейка*** моделей ТФП и Саха для построения широкодиапазонного уравнения состояния была предложена в [2]. Данное усовершенствование модели Саха существенно повышает точность такого широкодиапазонного уравнения состояния. При этом построенное уравнение состояния является полностью термодинамически согласованным, то есть все термодинамические функции строго удовлетворяют всем термодинамическим соотношениям.

Согласованность является преимуществом данного уравнения состояния по сравнению с известной библиотекой SESAME (Лос-Аламос): в SESAME термодинамические соотношения сильно нарушаются на границах сшивания различных моделей.

Литература

1. Калиткин Н.Н., Козлитин И.А. Модель Саха с неточечными ионами // ДАН, 471:5 (2016). В печати.
2. Калиткин Н.Н., Луцкий К.И. // ДАН, 457:2 (2014), 157–161.