

УДК 517.958:536; 51-74

СРАВНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИОНИЗОВАННЫХ ГАЗОВ ПО МОДЕЛЯМ ТОМАСА–ФЕРМИ И САХА В ОБЛАСТИ ИХ СОВМЕСТНОЙ ПРИМЕНИМОСТИ

Кузенов Виктор Витальевич^{1,2}, Шумаев Вячеслав Витальевич¹

1 – Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, Москва, 105005, 2-я Бауманская ул., д.5, стр.1

2 – Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, проспект Вернадского 101-1
chubchic@gmail.com

Аннотация

В работе выполнено сравнение зависимостей давления P , удельной внутренней энергии E и степени ионизации \bar{Z} от температуры T для плазмы фтора, азота и кислорода полученные на основе моделей ионизационного равновесия Саха и Томаса–Ферми в области их совместной применимости: $1 \text{ эВ} < T < 100 \text{ эВ}$, $10^{-7} < \rho < 10^{-3} \text{ г/см}^3$.

Ключевые слова: математическая модель, ионизация, модель Томаса–Ферми, модель ионизационного равновесия Саха.

THE COMPARISON OF IONIZED GASES THERMODYNAMIC PROPERTIES EVALUATED BY THOMAS–FERMI AND SAHA MODELS IN THE AREA OF THEIR COMMON APPLICABILITY

V. Kuzenov^{1,2}, V. Shumaev¹

1 – Bauman Moscow State Technical University, Moscow, 105005

2 – Institute for Problem in Mechanics RAS, Moscow, 119526

The pressure P , the specific internal energy E and the degree of ionization \bar{Z} depending on the temperature T are obtained for the plasma of fluoride, nitrogen and oxygen on the basis of the model of ionization equilibrium (Saha model) and the Thomas–Fermi model. These results are compared in the region where the both models work: $1 \text{ eV} < T < 100 \text{ eV}$, $10^{-7} < \rho < 10^{-3} \text{ g/cm}^3$.

Keywords: The Tomas-Fermi model, the Saha model, ionization, mathematical modeling.

1 Введение. Общая постановка задачи

В работе рассматривается вопрос о поиске области (по температуре и плотности ионизованных однокомпонентных газов), где модели ионизационного равновесия (Саха) [1–3] и Томаса–Ферми [4–9] количественно близки друг к другу. Эта задача будет рассматриваться в следующем диапазоне: температура $T = 1 \div 100 \text{ эВ}$ и плотность $\rho = 10^{-7} \div 10^{-3} \text{ г/см}^3$. Известно, что вещество при указанных параметрах удовлетворяет условиям локального термодинамического равновесия [1, 4].

Такие данные необходимы для разработки высокоэффективных плазменных технологий, расчета входа летательных аппаратов в верхние слои атмосфер планет, задачах инерциального и магнитного термоядерного синтеза и в различных астрофизических приложениях [10–15].

Особо отметим, что вопрос об интерполяционном переходе от модели Томаса–Ферми к модели Саха в области их совместной применимости в данной работе не рассматривается.

2 Модель Саха (модель ионизационного равновесия)

В модели ионизационного равновесия Саха предполагается достаточная разреженность исследуемого газа, а также возможность применимости статистики Больцмана к системе "связанных" электронов [1]. Будем считать также, что энергетические затраты на излучение не сказываются заметно на состоянии ионизационного равновесия.

Для расчета состава однокомпонентной плазмы и определения степени ионизации \bar{Z} решается система уравнений Саха–Эккерта (1) с учетом неидеальности (3), условий нормировки и квазинейтральности (4):

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

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

$$I_{m+1}^* = I_{m+1} - \Delta I_{m+1} = I_{m+1} - \frac{Z_{m+1} \cdot e^2}{r_D}, r_D = \sqrt{\frac{kT}{n_e e^2}}. \quad (3)$$

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

Здесь n_{m+1} , n_m – концентрация ионов с зарядом $m+1$ и m соответственно; Σ_m , Σ_{m+1} – статистические суммы; m_e – масса электрона; h – постоянная Планка; I_{m+1}^* , I_{m+1} – энергия ионизации с кулоновской поправкой и без неё; $Z_{m+1} = m+1$ – заряд иона; r_D – радиус Дебая, g_{zi} – статистические веса энергетических состояний.

При это согласно [1, 2] производится "обрезание" статистических сумм (2), т.е. предлагается проводить расчет статсумм до уровня с энергией ионизации, не превышающей kT . Отметим, что использованный в работе способ обрезания статистических сумм в диапазоне изменения параметров $T = 1 \div 100$ эВ и $\rho = 10^{-7} \div 10^{-3}$ г/см³ не приводит к заметным погрешностям в определении состава плазмы.

Полное (электронное P_e и ионное P_i) давление ионизованного газа вычисляется, как сумма парциальных давлений атомов и электронов [1]:

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

где N – число атомов; ρ – плотность ионизованного газа; k – постоянная Больцмана; T – температура.

Удельная внутренняя энергия ионизованного газа 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; α_m – концентрация ионов с зарядом, равным m ; W_m – энергия электронного возбуждения.

Область применимости модели Саха ограничивается проявлением эффектов сильной неидеальности плазмы при высоких плотностях ($\rho \sim 10^{-3}$ г/см³) и низких температурах ($T \sim$

1 эВ), а также эффектами нарушения локального ионизационного равновесия при низких плотностях ($\rho \sim 10^{-7}$ г/см³) и достаточно высоких температурах ($T \leq 100$ эВ) [1, 2].

Критерием, определяющим степень неидеальности плазмы, является условие малости энергии кулоновского взаимодействия заряженных частиц по сравнению с их кинетической энергией, что совпадает с условием применимости дебаевского приближения – число заряженных частиц в сфере радиуса r_D должно быть достаточно велико [1, 2]:

$$N_D = \frac{4}{3} \pi r_D^3 (n_e + n_0) \gg 1. \quad (7)$$

3 Модель Томаса–Ферми

Модель Томаса–Ферми имеет следующие предположения физической постановки [1, 8]: плазма рассматривается, как система атомных ячеек сферической формы. В модели газ считается состоящим из ядер и электронов. Ядра подчиняются статистике Больцмана и вносят свой вклад в уравнения состояния. Электроны рассматриваются как газ, находящейся в самосогласованном электростатическом поле $V(r)$. Электроны подчиняются статистике Ферми–Дирака.

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

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rV) = \frac{2}{\pi} (2\theta)^{\frac{3}{2}} I_{1/2} \left(\frac{V(r) + \mu}{\theta} \right) \quad (0 < r < r_0). \quad (8)$$

Граничные условия:

$$V(r) = Ze/r, \quad \text{при } r \rightarrow 0, \quad (9)$$

$$\left. \frac{dV(r)}{dr} \right|_{r=r_0} = 0, \quad \text{при } r \rightarrow r_0. \quad (10)$$

Здесь: $\theta = kT$; μ – химический потенциал, $I_{1/2}(x) = \int_0^\infty \frac{y^{\frac{1}{2}} dy}{1 + \exp(y-x)}$ – 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, определяющих уравнения состояния (термическое и калорическое) 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 [3–6]:

$$P_e = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dp \int_0^\pi d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{p^2 \cdot \sin \vartheta \cdot p^2 \cdot \cos^2 \vartheta}{1 + \exp\left(\frac{p^2}{2\theta} + \eta\right)} = \frac{(2\theta)^{\frac{5}{2}}}{6\pi^2} I_{3/2}(-\eta). \quad (11)$$

где ϑ и φ – углы в сферических координатах, $\eta = -\mu/\theta$. Для нахождения полного давления всей системы частиц, находящихся в атомной ячейке, необходимо учесть давление создаваемое ядрами. При высоких температурах эту систему (газ, состоящий из ядер) обычно рассматривают, как идеальный газ. Поэтому для полного давления (в ГПа) имеем:

$$P = 2,942 \cdot 10^4 \left(P_e + \frac{\theta}{\nu} \right). \quad (12)$$

где ν – объем атомной ячейки. Методика вычисления удельной внутренней энергии и энтропии плазмы приведена в [4–8].

Область применимости модели Томаса–Ферми определяется, в основном, двумя факторами: параметром вырождения и параметром неидеальности. Принято считать [4–8], что плазма будет являться вырожденной и неидеальной, если $\Gamma > 1$ и $\xi > 1$. Кроме этого следует отметить, что данная модель работает тогда, когда малы квантовые и обменные поправки к ней [7]: модель Томаса–Ферми начинает давать удовлетворительные результаты при любых концентрациях частиц начиная с температуры $T > 2-3$ эВ.

Параметр вырождения определяется, как число частиц в сфере радиуса длины волны де Бройля для электрона

$$\xi = n_e \cdot \lambda_e^3. \quad (13)$$

где $\lambda_e = \left(\frac{h^2}{2\pi m_e T} \right)^{1/2}$ – длина волны де Бройля для электрона. Параметр неидеальности, который определяется, как отношение энергии кулоновского взаимодействия электронов к их кинетической энергии

$$\Gamma = \frac{e^2 n_e^{1/3}}{E_k}. \quad (14)$$

где e – заряд электрона, n_e , E_k – концентрация и кинетическая энергия электронов. Если электроны подчиняются статистике Больцмана, то $E_k \sim T$. Для вырожденного электронного газа $E_k \sim \hbar^2 n_e^{2/3} / (2m_e)$.

В данной работе рассматриваются плазма в следующем диапазоне термодинамических параметров: $1 \text{ эВ} < T < 10^4 \text{ эВ}$, $10^{-7} < \rho < 10^{-3} \text{ г/см}^3$. Оценки показывают, что для данного диапазона параметров плазма является вырожденной и неидеальной, т.е. при малых плотностях и температурах параметры $\Gamma > 1$ и $\xi > 1$.

В таком диапазоне параметров модель ионизационного равновесия Саха приводит к большим ошибкам, но применение квантово-статистической конечно-температурной модели Томаса–Ферми оправдано.

4 Результаты

На рисунках ниже приведены результаты расчетов, которые выполнены с использованием моделей Саха и Томаса–Ферми. На этих рисунках показаны графические зависимости давления, внутренней энергии и степени ионизации от температуры для фтора в указанном выше диапазоне плотностей и температур (известно, что область термодинамических параметров $1 \text{ эВ} < T < 100 \text{ эВ}$, $10^{-7} < \rho < 10^{-3} \text{ г/см}^3$ описывается, как моделью Саха, так и моделью Томаса–Ферми [1, 2, 4]). Также приведены зависимости от температуры относительной погрешности Δ результатов расчета для фтора, азота и кислорода.

С целью поиска области количественной близости (области совместной применимости) моделей Саха и Томаса–Ферми для фтора, азота и кислорода произведено сравнение полного давления P , удельной внутренней энергии E и степени ионизации $\bar{Z} = n_e/n$.

На рис.1 приводятся зависимости, указанных выше величин (P , E , \bar{Z}), от температуры T для фтора для плотности $\rho = 10^{-3} \text{ г/см}^3$.

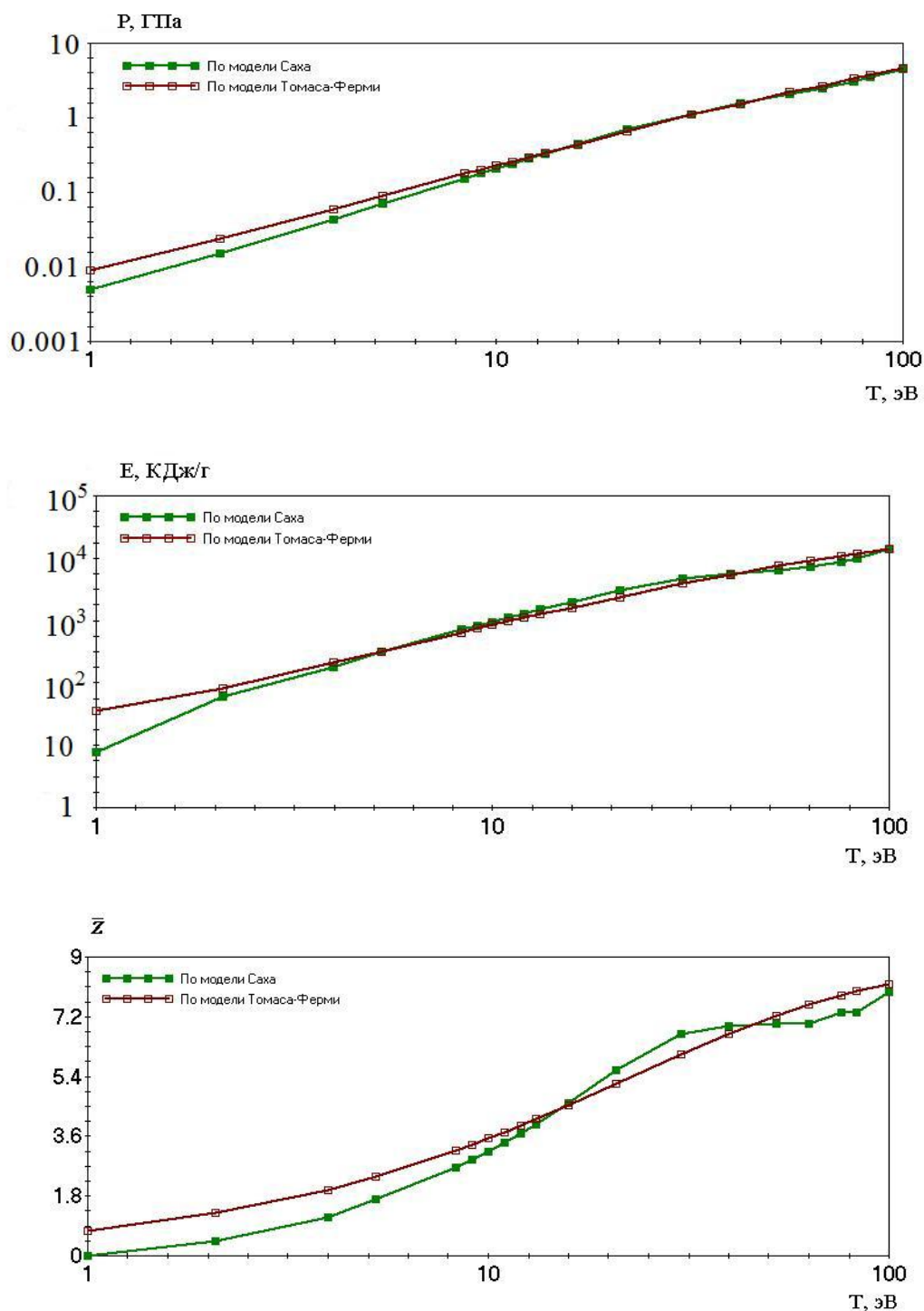


Рис.1. Зависимости полного давления P , удельной внутренней энергии E и степени ионизации \bar{Z} от температуры T для фтора при плотности 10^{-3} г/см³, полученные на основе моделей Саха и Томаса-Ферми.

На рис.2 изображены значения относительной погрешности Δ , полученной на основе двух вышеописанных моделей. При этом под относительной погрешностью Δ результатов расчетов, выполненных с помощью модели Саха и Томаса-Ферми, понимается следующее выражение:

$$\Delta = \frac{|P_{ТФ} - P_{Саха}|}{\min(P_{ТФ}, P_{Саха})}, \%, \tag{15}$$

где $P_{ТФ}$, $P_{Саха}$ – значение одного из трёх параметров (P , E , \bar{Z}), определяемых на основе модели Томаса–Ферми и Саха соответственно.

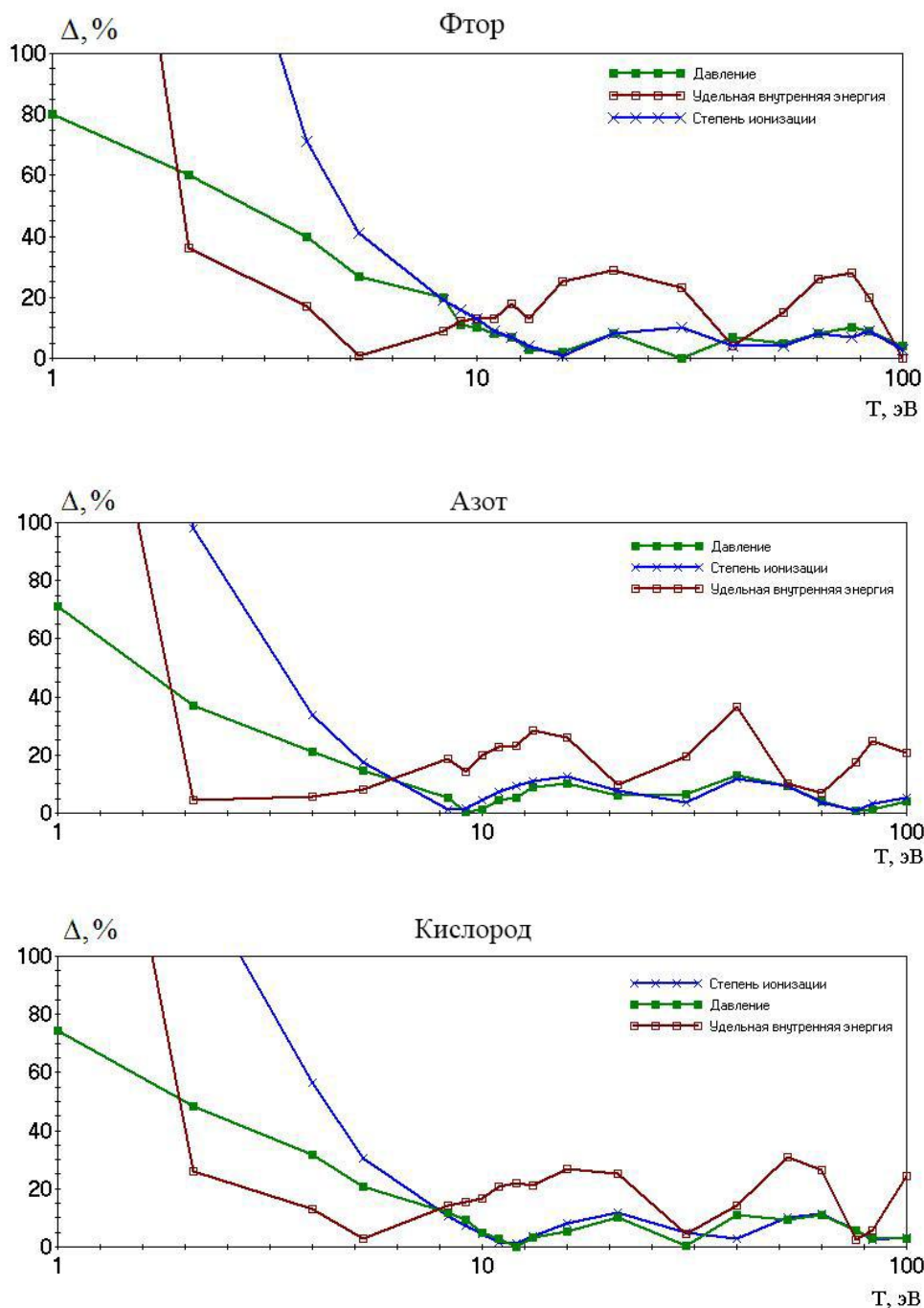


Рис.2. Относительная погрешность Δ результатов расчета по моделям Саха и Томаса–Ферми в зависимости от температуры T для фтора, азота и кислорода при плотности 10^{-3} г/см³.

Из рис.2 следует, что в диапазоне температур (1÷6) эВ наблюдается значительная (на порядок величины) разница между результатами расчета по моделям Томаса–Ферми и Саха. Эта разница объясняется тем, что термодинамические параметры, полученные по модели Томаса–Ферми, имеют заметную ошибку в данном диапазоне температур [4–8].

При температурах $T > 10$ эВ (см. рис.2) обе модели показывают качественно сходные результаты, однако величина относительной погрешности Δ находится приблизительно на уровне 10% для давления и степени ионизации и 20% для удельной внутренней энергии, а также не уменьшается с ростом температуры T .

5 Заключение

Для фтора азота и кислорода, на основе результатов проведенных расчетов, выполнен поиск области количественной близости (области совместной применимости) моделей Саха и Томаса–Ферми. С этой целью для плазм перечисленных выше веществ в работе сравнивались (для области изменения термодинамических параметров $1 \text{ эВ} < T < 100 \text{ эВ}$, $10^{-7} < \rho < 10^{-3} \text{ г/см}^3$) зависимости давления P , удельной внутренней энергии E и степени ионизации \bar{Z} от температуры T . Установлено, что при температуре $T \geq 10$ эВ обе модели показывают сходные результаты, однако при низких температурах наблюдается значительное расхождение в результатах, объясняемое попаданием модели Томаса–Ферми в область своей плохой применимости.

Работа выполнена в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности Министерства образования и науки Российской Федерации № 13.79.2014/К.

Литература

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных явлений гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 688 с.
2. Термодинамические и оптические свойства ионизованных газов при температурах до 100 эВ: Справочник / Ю.В. Бойко [и др.] М.: Энергоатомиздат. 1988. 192 с.
3. Протасов Ю.С., Протасов Ю.Ю., Телех В.Д. Разработка автоматизированной системы научных и инженерных расчетов термодинамических, оптических и транспортных свойств газоплазменных активных сред и конструкционных материалов энергетических установок // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Машиностроение». 2003. № 3. С. 55–72.
4. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчёта росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Физматлит, 2000. 400 с.
5. Киржниц Д.А. О границах применимости квазиклассического уравнения состояния вещества // ЖЭТФ. 1958. Т. 35, №. 6. С. 1545–1557.
6. Киржниц Д.А., Шпатаковская Г.В. Осцилляционные эффекты атомной структуры // ЖЭТФ. 1972. Т. 62, № 6. С. 2082–2086.
7. Dyachkov S., Levashov P. Region of validity of the finite-temperature Thomas–Fermi model with respect to quantum and exchange corrections // Phys. Plasmas. 2014. V. 21, № 5. 052702.
8. Кузенов В.В., Рыжков С.В., Шумаев В.В. Определение термодинамических свойств замагниченной плазмы на основе модели Томаса–Ферми // Прикладная физика. 2014. № 3. С. 22–25.
9. Кузенов В.В., Рыжков С.В., Шумаев В.В. Применение модели Томаса–Ферми для определения термодинамических свойств замагниченной плазмы. //Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2014. Т. 15. Вып. 3. http://chemphys.edu.ru/media/files/14_aphm2013.pdf
10. Кузенов В.В., Рыжков С.В. Математическая модель взаимодействия лазерных пучков высокой энергии импульса с плазменной мишенью, находящейся в затравочном магнитном поле // Препринт ИПМех им. А.Ю. Ишлинского РАН. 2010. № 942. 57 с.

11. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. Numerical modeling of magnetized plasma compressed by the laser beam: and plasma jets // *Problems of Atomic Science and Technology*. 2013. № 1 (83). P. 12–14.
12. Рыжков С.В. Современное состояние, проблемы и перспективы термоядерных установок на основе магнитно-инерционного удержания горячей плазмы // *Известия РАН. Серия Физическая*. 2014. Т. 78, № 5. С. 647–653.
13. Глушко Г.С., Иванов Н.Э., Крюков И.А. Моделирование турбулентности в сверхзвуковых струйных течениях // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2010. Т. 9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-023.pdf>
14. Суржиков С.Т. Перспективы многоуровневого подхода к задачам компьютерной аэрофизики // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2008. Т. 7. <http://chemphys.edu.ru/media/files/2008-09-01-002.pdf>
15. Дикалюк А.С., Суржиков С.Т. Сравнение прогонки четвертого и второго порядков точности на примере задачи, имеющей аналитическое решение // *Физико-химическая кинетика в газовой динамике*. 2010. Т. 9. <http://www.chemphys.edu.ru/pdf/2010-01-12-037.pdf>

Статья поступила в редакцию 20 ноября 2014 г.