

Уравнение состояния вещества в модели среднего иона для лазерной плазмы

С.А.Бельков, С.В.Бондаренко, Е.И.Митрофанов

Предложена термодинамически-согласованная модель расчета уравнения состояния плазмы в приближении среднего иона, учитывающая химические связи в твердом теле, давление электронных оболочек иона, возникающее при его сжатии, а также вырождение электронного газа при высоких плотностях и низких температурах. Расчеты ударного сжатия различных веществ, таких как жидкий дейтерий, Al, Be, Fe, Au, по этой модели показали, что она удовлетворительно описывает как имеющиеся экспериментальные результаты, так и результаты расчетов с использованием модели Томаса–Ферми в широком диапазоне давлений за фронтом ударной волны. Выполнено также сравнение изотерм указанных веществ в приближении среднего иона и в модели Томаса–Ферми для разных температур.

Ключевые слова: уравнение состояния, модель среднего иона, лазерная плазма.

При поглощении мощного лазерного излучения могут быть получены состояния конденсированного вещества с чрезвычайно высокой концентрацией энергии. Такие состояния, в частности, достигаются в настоящее время в экспериментах по инерционному удержанию плазмы на крупнейших лазерных установках (NOVA в США, «Искра-5» в России, «Гекко-12» в Японии и др.). Это позволяет использовать возможности таких установок для проведения экспериментов по исследованию уравнений состояний в экстремальных условиях. Так, в частности, в США на лазерной установке NOVA недавно были проведены эксперименты по сжатию жидкого дейтерия [1]. Подобные условия реализуются также в экспериментах по взаимодействию ионных пучков с веществом, в экспериментах с лайнерами, пинчами, во взрывных экспериментах, в том числе экспериментах с ударными трубами.

Такие эксперименты анализируются с использованием численного газодинамического моделирования, при котором необходимо знать уравнения состояния вещества, обычно имеющее вид функциональной зависимости давления p и энергии E вещества от плотности ρ и температуры T . Точность, достигаемая при численном моделировании, существенным образом зависит от точности используемого уравнения состояния (так, для типичных приложений требуется погрешность данных, рассчитанных по уравнениям состояния, около 15–20 % или лучше). Кроме того, расчеты по газодинамическим программам наталкиваются на значительные трудности, если данные, полученные по уравнениям состояния, не будут представлены в виде достаточно гладких функций плотности и температуры. Требуется также, чтобы удельная теплоемкость $c_V = (\partial E / \partial T)_{\rho=\text{const}}$ и скорость звука $c_s^2 = (\partial p / \partial \rho)_{S=\text{const}}$ (где S – энтропия) были положитель-

ными во всей интересующей нас области параметров (плотности и температуры), при которых проводится моделирование, а энергия и давление – термодинамически-согласованными.

Исследованию уравнений состояния посвящено большое число экспериментальных (см. обзор [1] и ссылки в нем) и теоретических (см., напр., [2]) работ. Одной из широко используемых для расчета уравнения состояния моделей любого вещества является модель, основанная на приближении Томаса–Ферми [2]. Являясь универсальной, она, тем не менее, имеет ряд ограничений. Во-первых, эта модель применима только в условиях локального термодинамического равновесия, во-вторых, численные расчеты по ней требуют весьма больших затрат машинного времени при решении нелинейного дифференциального уравнения для самосогласованного распределения потенциала и электронной плотности. По этой причине ее использование в газодинамических программах возможно лишь в виде заранее рассчитанных таблиц.

Диапазон изменения плотностей и температур, характеризующих состояние вещества в лазерной плазме, чрезвычайно широк: от плотностей больших и равных твердотельной плотности и близких к нулю температур (сильно сжатое конденсированное вещество за фронтом ударной волны) до предельно малых плотностей и высоких температур ~ 1 кэВ (неравновесная горячая корональная плазма). Следовательно, необходима универсальная методика, позволяющая описывать уравнение состояния вещества в широком диапазоне температур и плотностей.

Разработка моделей поуровневой кинетики в приближении среднего иона позволяет создать модель уравнения состояния, применимую в условиях, далеких от состояния локального термодинамического равновесия (что невозможно в модели Томаса–Ферми), например в условиях, реализующихся в плазме лазерной короны. Под последней понимается область нагретой и разреженной ($T \sim 1$ кэВ, $\rho \sim 1$ мг/см³) плазмы, сильно поглощающей

Всероссийский федеральный ядерный центр – ВНИИЭФ, Россия, 607190 Саров Нижегород. обл., просп. Мира, 37; тел.: (831-30) 4-04-72, факс: (831-30) 5-46-65, эл. почта: belkov@otd13.vniief.ru

интенсивное лазерное излучение. Возможность учета в модели среднего иона состояний вещества, для которых влияние давления холодного вещества оказывается существенным (например, для вещества за фронтом ударной волны), позволяет в широком диапазоне температур и плотностей распространить область применения модели на описание состояний вещества, включающих, с одной стороны, состояния сильно сжатого вещества с плотностями, превышающими твердотельные, и, с другой стороны, состояния горячей и разреженной плазмы.

1. Энергия электронного компонента неидеальной плазмы

Рассмотрим плазму, состоящую из смеси ионов различных сортов с зарядом ядра Z_j , атомным номером A_j и концентрацией C_j . Будем, как это принято в приближении среднего иона, описывать распределение чисел заполнения ионов по степеням ионизации j -го элемента одним ионом. Для этого иона распределение средних чисел заполнения или населенностей P_{jk} (которые теперь уже рассматриваются как непрерывные функции параметров плазмы) атомных уровней с квантовыми числами k таково, что степень ионизации данного среднего иона $Z_j^* = Z_j - \sum_k P_{jk}$ равна средней степени ионизации j -го элемента.

Пусть плотность плазмы и температуры электронов и ионов суть ρ , T_e и T_i соответственно. Средняя степень ионизации и средний атомный вес плазмы вычисляются по формулам

$$\langle Z \rangle = \sum_j C_j Z_j^*, \quad \langle A \rangle = \sum_j C_j A_j.$$

Концентрации ионов и электронов определяются через плотность плазмы, средний атомный вес и средний заряд следующим образом: $N_i = N_A \rho / \langle A \rangle$, $n_e = \langle Z \rangle n_i$, где N_A – число Авогадро.

В плазме ионный и электронный компоненты можно разделить на два слабо взаимодействующих между собой компонента, каждый из которых вносит аддитивный вклад в полное уравнение состояния. Для ионов практически во всей интересующей нас области параметров давлений и температур, характерных для лазерного взаимодействия с веществом, хорошим приближением для расчета уравнения состояния является приближение идеального бoльцмановского газа. Это означает, что энергию ионов на единицу массы плазмы E_i и их давление можно вычислять по формулам

$$E_i = c_{Vi} T_i, \quad p_i = \frac{c_{Vi} T_i \rho}{\gamma - 1}, \quad c_{Vi} = \frac{N_A}{\langle A \rangle}, \quad \gamma = \frac{5}{3}. \quad (1)$$

Состояние электронов может быть описано уравнением состояния типа (1) только при очень высоких температурах и низких плотностях, когда ионы плазмы полностью ионизованы и, с одной стороны, затраты энергии на ионизацию малы по сравнению с энергией теплового движения свободных электронов, а с другой стороны, вырождением электронного газа уже можно пренебречь, т. е. температура электронов много больше энергии Ферми. Для плазмы с малой плотностью ($\rho \leq 10^{-2}$ г/см³) и температурой около 1 кэВ (типичные параметры плазмы в лазерной короне) такие условия реализуются при относительно небольшом (менее 20) заряде ядра иона, т. е.

для относительно легких элементов. Для тяжелых элементов или более низких температур, обычно характерных для рентгеновской короны ($T_e \sim 0.09 - 0.3$ кэВ, $\rho \sim 0.2 - 1$ г/см³), плазма уже не является полностью ионизованной, и даже если вырождением еще можно пренебречь (т. е. по-прежнему температура электронов выше энергии Ферми), в уравнении состояния необходимо учитывать потери тепловой энергии на ионизацию электронов. При еще более низких температурах и более высоких плотностях вклад вырождения электронного газа становится определяющим.

Тем не менее и в этом случае сильно неидеальной плазмы можно считать, что все электроны разделены между двумя подсистемами – с дискретным (связанные электроны) и непрерывным (свободные электроны) спектрами энергий. Связанные электроны по-прежнему описываются числами заполнения P_{jk} , а свободным электронам можно приписать некоторую температуру T_e . Если энергией обменного взаимодействия между этими двумя подсистемами можно пренебречь, то полная энергия электронного компонента плазмы может быть вычислена как сумма энергий его различных подсистем:

$$E_e = E_{fe} + E_{be} + E_{ci} + E_{cb}, \quad (2)$$

где кроме вышеупомянутых энергий свободных (E_{fe}) и связанных (E_{be}) электронов учтены также корреляционная энергия кулоновского взаимодействия ионов E_{ci} и энергия химической связи атомов в твердом теле E_{cb} . Рассмотрим каждое слагаемое в (2) по отдельности.

1.1. Энергия свободных электронов

Если предположить, что свободные электроны практически не взаимодействуют с ионами, то к ним применима статистика Ферми и можно воспользоваться известной формулой для энергии ферми-газа [3]

$$E_{fe} = \frac{\sqrt{2} m_e^{3/2} T_e^{5/2}}{\pi^2 \hbar^3 \rho} I_{3/2} \left(\frac{\mu}{T_e} \right). \quad (3)$$

Здесь $I_{3/2}(\mu/T_e)$ – интеграл Ферми степени $\nu = 3/2$ (по определению $I_\nu(x) = \int_0^\infty y^\nu [\exp(y-x) + 1]^{-1} dy$); μ – химический потенциал свободных электронов. Для $I_{3/2}(x)$ можно использовать аппроксимацию

$$I_{3/2}(x) = \frac{3}{2} I_{1/2}(x) \left\{ 1 + 1.031 [I_{1/2}(x)]^{2/3} + 0.144 [I_{1/2}(x)]^2 \right\}^{1/3}. \quad (4)$$

Данная аппроксимация обеспечивает правильные (с точностью до вторых членов разложения в ряд Тейлора) предельные переходы E_{fe} (3) к E_{fe} в уравнении состояния идеального бoльцмановского газа при высоких температурах свободных электронов и к E_{fe} в уравнении вырожденного ферми-газа при низких температурах.

В свою очередь интеграл Ферми степени 1/2 связан с плотностью свободных электронов n_e условием нормировки [3]

$$n_e = \frac{\sqrt{2} (m_e T_e)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} I_{1/2} \left(\frac{\mu}{T_e} \right). \quad (5)$$

Следовательно,

$$E_{fe} = \frac{3}{2} \frac{T_e n_e}{\rho} \left[1 + 1.031 I_{1/2}^2 \left(\frac{\mu}{T_e} \right) + 0.144 I_{1/2}^2 \left(\frac{\mu}{T_e} \right) \right]^{1/3}. \quad (6)$$

Действительно, в пределе очень высоких температур и низких плотностей из (6) получаем выражение для энергии идеального бoльцмановского газа:

$$E_{fe} = \frac{3 n_e T_e}{2 \rho}.$$

В обратном пределе низких температур и высоких плотностей получаем уравнение для энергии вырожденного ферми-газа:

$$E_{fe} = E_{fe}^{(0)} + \frac{c_{Ve}^{(0)}}{2} T_e^2, \quad E_{fe}^{(0)} = \frac{3(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2 n_e^{5/3}}{10 m_e \rho},$$

$$c_{Ve}^{(0)} = \left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3} \frac{m_e n_e^{1/3}}{\hbar^2 \rho}.$$

1.2. Энергия связанных электронов

При известных населенностях уровней j -го иона P_{jk} энергия связанных электронов определяется так же, как и в стандартной модели водородоподобного среднего иона [4, 5]:

$$E_{be} = \beta \sum_j C_j E_j, \quad E_j = - \sum_{k=1}^{N_j^{\max}} P_{jk} (Q_{jk}/k)^2, \quad (7)$$

где E_j – энергия связанных электронов j -го иона; Q_{jk} – экранированный заряд ядра на k -м уровне j -го иона; $\beta = I_H N_A / \langle A \rangle$; $I_H = e^2 / 2a_0$ – потенциал ионизации водорода; $a_0 = \hbar^2 / m_e e^2$ – боровский радиус электрона; N_j^{\max} – максимальное число уровней иона сорта j .

В общем случае произвольных температур населенности каждого иона находятся из решения системы кинетических уравнений [5]. Однако в пределе, когда температура электронов стремится к нулю, решение данной системы уравнений будет мало отличаться от распределения населенностей в соответствии со статистическими весами (населенностями при нулевой температуре) g_k каждого уровня. Для изолированного водородоподобного атома $g_k = 2k^2$ и электроны заполняют уровни с наименьшими энергиями, вплоть до некоторого уровня с главным квантовым числом k_{\max} , определяемым из условия нейтральности атома. Учитывая, что в общем случае каждый уровень j -го иона кроме главного квантового числа k характеризуется также и орбитальным квантовым числом l , можно записать

$$g_{lk} = \sum_{l=0}^{k-1} g_{jkl}, \quad g_{jkl} = 2(l+1), \quad l = 0, 1, \dots, k-1.$$

Обозначим населенности k -го уровня (имеющего орбитальное квантовое число l) j -го нейтрального изолированного атома через $P_{jkl}^{(0)}$; тогда

$$P_{jk}^{(0)} = \sum_{l=0}^{k-1} P_{jkl}^{(0)}, \quad P_{jkl}^{(0)} = g_{jkl}, \quad Z_j = \sum_{k=1}^{k_{\max}} P_{jk}^{(0)}.$$

При сжатии атомов происходит снятие вырождения и некоторые электроны становятся свободными. Кроме того, взаимодействие атомов или ионов друг с другом приводит также к изменению энергии связанных состояний. Данный эффект автоматически учитывается как в простой модели Томаса–Ферми [6], так и в более сложных моделях самосогласованного поля типа модели Хартри–Фока [7].

Учет влияния окружающих ионов на распределение электронов в модели среднего иона, вообще говоря, можно провести только феноменологически. Так, для этого в [8] было предложено ввести такую зависимость статистического веса состояния ξ , характеризуемого совокупностью двух квантовых чисел k и l , от плотности вещества, чтобы при малых плотностях получался статистический вес состояния изолированного иона, а при больших плотностях статистический вес стремился бы к нулю. Этот выбор моделирует снятие вырождения состояния ξ при взаимодействии с окружающими ионами (например, из-за штарковского расщепления уровня), в результате чего часть связанных состояний переходит в область непрерывного спектра.

Наиболее простой функцией, обладающей данными свойствами является функция вида

$$g_{j\xi} = \frac{P_{j\xi}^{(0)}}{1 + \alpha_{j1} (R_{j\xi}^{(0)} / R_0)^{\alpha_{j2}}}, \quad (8)$$

где $R_0 = (\langle A \rangle / \frac{4}{3} \pi N_A \rho)^{4/3}$ – радиус ионной сферы; $R_{j\xi}^{(2)}$ – эффективный радиус орбиты уровня ξ изолированного j -го иона. В [5] для модели среднего иона с учетом l -расщепления было предложено в качестве эффективного радиуса оболочки использовать средний радиус дипольного взаимодействия $R_{jkl} \sim \langle 1/r^2 \rangle^{-1/2}$, который при заданных квантовых числах k и l и водородоподобных волновых функциях электрона вычисляется по формуле

$$R_{jkl} = \frac{a_0 k^{3/2}}{Q_{jk}} \left(l + \frac{1}{2} \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Следовательно, средняя степень ионизации $\langle Z \rangle$ холодного вещества с плотностью ρ может быть вычислена с использованием (8) и (9):

$$\langle Z \rangle = \sum_j C_j \sum_{\xi} \left(P_{j\xi}^{(0)} - g_{j\xi} \right). \quad (10)$$

Следуя работам [5, 8], мы находили коэффициенты α_{j1} и α_{j2} в (8), при которых зависимость степени ионизации холодного (при $T = 0$) вещества от плотности, определяемой формулами (8)–(10), наиболее близка к аналогичной зависимости, полученной в рамках модели Томаса–Ферми [6]. Константы α_{j1} и α_{j2} для элементов с разным зарядом ядра (порядковым номером элемента) Z_j , изменяющимся в пределах от 1 до 100, приведены на рис.1. Видно, что коэффициенты α_{j1} и α_{j2} являются квазипериодическими медленно растущими (в смысле сред-

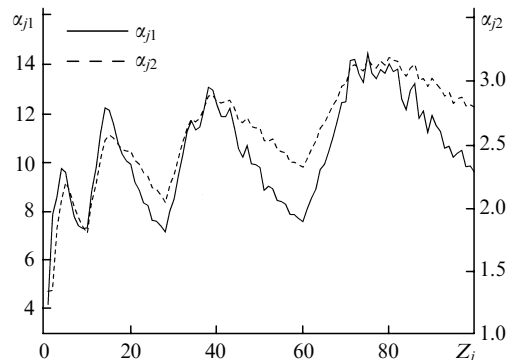


Рис.1. Зависимости констант α_{j1} , α_{j2} от атомного номера элемента.

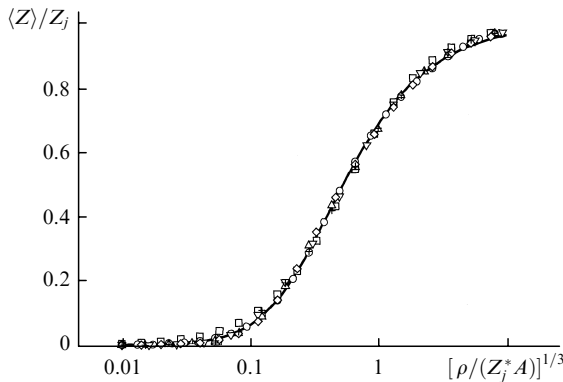


Рис.2. Зависимости «холодной» степени ионизации от плотности, рассчитанные по модели Томаса–Ферми (сплошная кривая) и по модели среднего иона для заряда ядра $Z_j = 1$ (□), 10 (○), 20 (△), 40 (▽), 60 (◇) и 80 (+).

него значения) функциями порядкового номера элемента с периодом, отвечающим структуре заполнения электронных оболочек различных элементов. Средние значения коэффициентов изменяются с ростом Z_j в диапазонах от 8.5 до 11 для α_{j1} и от 2 до ~ 3 для α_{j2} соответственно. На рис.2 сравниваются зависимости средней степени ионизации от плотности, рассчитанные по модели Томаса–Ферми и по формулам (8)–(10), для ряда химических элементов с разными зарядами ядра Z_j и с соответствующими этим элементам константами α_{j1} и α_{j2} .

Возвращаясь к случаю произвольных температур, можно из общего выражения для энергии связанных электронов (7) выделить часть, связанную с ионизацией давлением, и часть, связанную с ионизацией, обусловленной ростом температуры, т. е. представить E_{bc} в следующем виде:

$$E_{bc} = E_{bc}^p + E_{bc}^T. \tag{11}$$

При этом E_{bc} вычисляется по формуле (7) с населенностями, определяемыми из решения системы кинетических уравнений для заданных плотности и температуры плазмы, а E_{bc}^p – по формуле (7), но с населенностями, отвечающими данной плотности при нулевой температуре, т. е. равными статистическим весам, рассчитанным по формулам (8), (9). Второе слагаемое в (11) представляет собой потери тепловой энергии на ионизацию. (Потери на ионизацию, определенные именно таким образом, учитываются в стандартном уравнении состояния для модели среднего иона в программе СНДП [9].) Это слагаемое очень слабо зависит от плотности и поэтому не дает вклада в давление электронов, в то время как первое слагаемое зависит только от плотности и именно оно определяет вклад электронных оболочек в «холодное» давление, о чем пойдет речь ниже.

1.3. Корреляционная энергия кулоновского взаимодействия ионов

Другое влияние плотности, о котором упоминалось выше, обусловлено уменьшением энергии связанных состояний иона j -го элемента, находящегося в кулоновском поле своих соседей. Корреляционная энергия частиц плазмы в пределе нулевых температур может быть вычислена аналогично тому, как это было сделано в [3] для случая идеальной бoльцмановской плазмы:

$$E_{ci} = -0.5\beta a_0 \frac{\langle Z \rangle^2}{R_0} \left[1 - \exp\left(-\frac{R_0}{R_D}\right) \right], \tag{12}$$

где

$$R_D = \frac{V_F}{\sqrt{3}\omega_{pe}} = \frac{(3\pi^2)^{1/3}\hbar}{2e\sqrt{3\pi m_e}} \left(\frac{\langle A \rangle}{\langle Z \rangle \rho N_A} \right)^{1/6}$$

– дебаевский радиус вырожденной плазмы; ω_{pe} – плазменная частота электронов; вместо тепловой скорости электронов используется скорость Ферми V_F [10]. Снижение потенциала ионизации уровня ξ определяется из выражения

$$\Delta E_\xi = -\frac{\partial E_{ci}}{\partial \langle Z \rangle}. \tag{13}$$

1.4. Энергия химической связи

Давление свободных электронов плазмы металла, вычисленное в приближении вырожденного ферми-газа при твердотельных плотностях и нулевой температуре, будет составлять десятки и даже сотни килобар. Такие высокие давления в реальных веществах уравниваются силами химической связи. По этой причине для получения корректного уравнения состояния, применимого в том числе и в области плотностей, близких к плотности твердого тела, необходимо вводить поправки, учитывающие химическую связь атомов и молекул в веществе.

Следуя работам [2, 11], определим энергию химической связи следующей полуэмпирической формулой:

$$E_{cb} = \varepsilon_0 \left[1 - \exp \left\{ b \left[1 - \left(\frac{\rho_s}{\rho} \right)^{1/3} \right] \right\} \right], \tag{14}$$

где ρ_s – плотность твердого тела. Константы ε_0 и b в формуле (14) находятся из условия, что полное давление электронного компонента p_e^{tot} при начальной плотности, равной плотности твердого тела ρ_s при нормальных условиях, и нулевой температуре вещества равно нулю ($p_e^{\text{tot}}(\rho_s, 0) = 0$), а сжимаемость B равна экспериментально измеренной сжимаемости вещества при нормальных условиях ($B(\rho_s, 0) = B_{\text{exp}}$). Теперь полная энергия электронов запишется в виде

$$E_e^{\text{tot}}(\rho, T_e) = E_{fe} + E_{bc} + E_{ci} + E_{cb} + E_0, \tag{15}$$

где

$$E_0 = -(E_{fe} + E_{bc} + E_{ci} + E_{cb})|_{\rho=\rho_s, T_e=0} \\ \equiv -E_c(\rho = \rho_s, T_e = 0).$$

2. Давление электронного компонента

В соответствии с термодинамическими равенствами давление электронов определяется через производную полной энергии электронов E_e^{tot} по плотности при постоянной энтропии или через производную полной свободной энергии F_e^{tot} по плотности при постоянной температуре:

$$p_e^{\text{tot}}(\rho, T_e) = \rho^2 \frac{\partial E_e^{\text{tot}}}{\partial \rho} \Big|_{S=\text{const}} = \rho^2 \frac{\partial F_e^{\text{tot}}}{\partial \rho} \Big|_{T_e=\text{const}}.$$

При этом полную свободную энергию можно также представить в виде суммы соответствующих свободных энергий: $F_e^{\text{tot}}(\rho, T_e) = F_{fe} + F_{be} + F_{ci} + F_{cb}$, а полное давление равно сумме парциальных давлений: $p_e^{\text{tot}}(\rho, T_e) = p_{fe} + p_{be} + p_{ci} + p_{cb}$.

Поскольку E_{ci} и E_{cb} зависят только от плотности, то соответствующие свободные энергии просто равны корреляционной энергии и энергии химической связи. Мы представили энергию связанных электронов в виде суммы двух слагаемых (11), первое из которых зависит только от плотности, а второе – только от температуры, следовательно, давление связанных электронов будет определяться только первым слагаемым в (11). Для свободных электронов получаем стандартную связь между давлением и энергией [3], но с поправкой, связанной с тем, что при сжатии вещества при нулевой температуре средний заряд $\langle Z \rangle$ плазмы зависит от плотности ρ .

Окончательно для расчета парциальных давлений получаем следующие выражения:

$$p_{fe} = \frac{2}{3} \rho E_{fe} + \langle Z \rangle f_z \left. \frac{\partial E_{fe}}{\partial \langle Z \rangle} \right|_{T_e=0} = \frac{2}{3} \rho E_{fe} + \frac{5}{3} f_z \rho E_{fe}^{(0)},$$

$$f_z = \left. \frac{\rho}{\langle Z \rangle} \frac{\partial \langle Z \rangle}{\partial \rho} \right|_{T_e=0}, \quad p_{be} = \rho^2 \frac{\partial E_{be}^p}{\partial \rho},$$

$$p_{ci} = \frac{2}{3} \rho E_{ci} \left[0.5 + 3f_z + 0.25(f_z - 1) \frac{(R_0/R_D) \exp(-R_0/R_D)}{1 - \exp(-R_0/R_D)} \right],$$

$$p_{cb} = -\frac{E_0 b \rho_s}{3} \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^{3/2} \exp \left\{ b \left[1 - \left(\frac{\rho_s}{\rho} \right)^{1/3} \right] \right\}.$$

Соответственно, зная полное давление и вычислив производную давления по плотности, можно найти скорость звука c_s и сжимаемость B :

$$c_s = \left(\frac{\partial p_e^{\text{tot}}}{\partial \rho} \right)^{1/2}, \quad B = \rho \frac{\partial p_e^{\text{tot}}}{\partial \rho}.$$

Таким образом, формулы (3)–(5), (7), (11), (12), (14)–(16) полностью описывают термодинамически-самосогласованное уравнение состояния электронов для модели ионизации в приближении среднего иона.

3. Результаты расчетов

Изложенный выше подход реализован в газодинамических программах СНДП и МИМОЗА-НД. Результаты расчетов ударного сжатия вещества по этой модели сравнивались с экспериментальными данными, а также с результатами расчетов по модели Томаса–Ферми. Расчеты проводились для жидкого D_2 , Be , Al , Fe и Au при давлениях за фронтом ударной волны, варьирующихся в пределах 0.01 – 1000 Мбар.

Как показали наши расчеты, использование в выражении (8) констант α_{j1} и α_{j2} , определенных по аппроксимации «холодной» кривой ионизации (см. рис.1), оказывается довольно грубым приближением при сравнении расчетов по программе СНДП как с экспериментами, так и с расчетами адиабаты Гюгонно при использовании уравнения состояния по модели Томаса–Ферми. Это

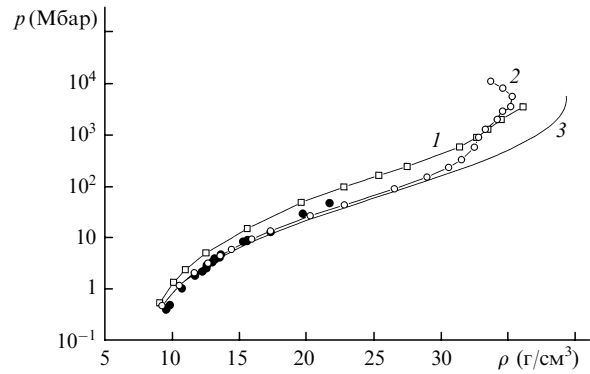


Рис.3. Ударная адиабата железа, рассчитанная с использованием уравнения состояния вещества по модели среднего иона (1, 2) для констант $\alpha_1 = 7.64$ (1) и 3.72 (2), $\alpha_2 = 2.14$ (1) и 3.03 (2), а также результаты экспериментов [1, 12, 13] (●) и расчетов с использованием уравнения состояния вещества по модели Томаса–Ферми (3).

проиллюстрировано на $p - \rho$ -диаграмме железа (рис.3). Вообще говоря, степень ионизации в модели Томаса–Ферми не является точно определенной величиной, а имеет скорее условный характер. Более физически обусловленной, однозначно определенной характеристикой является полная энергия электронов.

В модели среднего иона при $T = 0$ полная энергия электронов (без учета энергии химической связи) однозначно определяется формулами (3), (7) и (12), причем данные формулы обеспечивают качественно правильные зависимости от плотности в пределе как высоких ($E \propto \rho^{3/2}$ при $\rho \rightarrow \infty$), так и низких ($E \rightarrow \text{const}$ при $\rho \rightarrow 0$) плотностей. Таким образом, лучшим приближением должны быть константы α_{j1} и α_{j2} , определенные по аппроксимации «холодной» зависимости полной энергии электронов от плотности.

На рис.4 приведены расчетные «холодные» зависимости от плотности плазмы энергии электронов (отсчитанной от энергии электронов $E^{(0)}$ изолированного, полностью нейтрального атома) для модели Томаса–Ферми и энергии ионов нескольких элементов для модели среднего иона с оптимизированными константами α_{j1} и α_{j2} . Видно, что константы α_{j1} и α_{j2} удается подобрать таким образом, что в широком диапазоне изменения плотности плазмы энергия электронов, рассчитанная по модели среднего иона, удовлетворительно совпадает с результатами расчета по модели Томаса–Ферми.

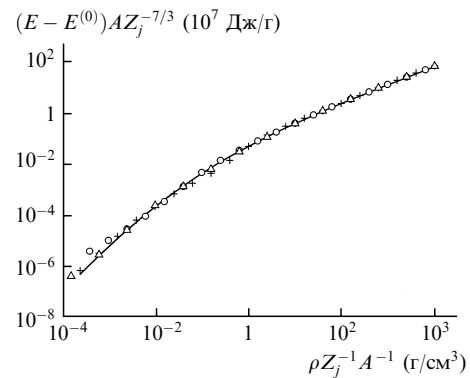


Рис.4. Зависимости энергии электронов при нулевой температуре для модели Томаса–Ферми (кривая) и энергии ионов Al (+), Fe (o) и Au (Δ) для модели среднего иона (точки) от плотности при оптимизированных константах α_{j1} и α_{j2} .

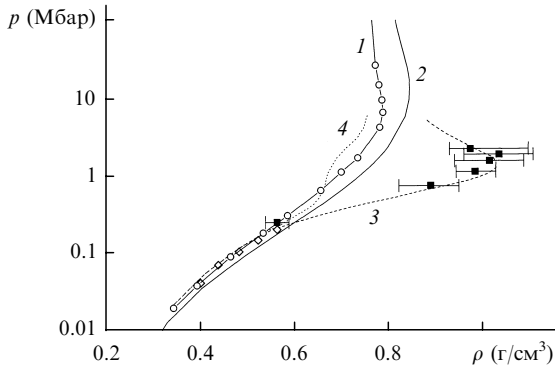


Рис.5. Ударная адиабата жидкого дейтерия, рассчитанная с использованием уравнения состояния вещества по модели среднего иона (1), а также результаты экспериментов [14] (\diamond), [15] (\blacksquare), расчетов с использованием уравнения состояния вещества по модели Томаса – Ферми (2) и работ [16] (3) и [17] (4).

Расчеты ударного сжатия, проведенные по программе СНДП для железа с новыми константами α_{j1} и α_{j2} , также проиллюстрированы на рис.3. В этом случае удается получить лучшее соответствие результатов расчета экспериментальным данным во всей области давлений до 30 Мбар. Наибольшее отличие от расчетов по модели Томаса – Ферми возникает в области высоких давлений (более 100 Мбар), где, к сожалению, нам не удалось найти экспериментальных данных. Это отличие связано с ролью оболочечных эффектов, которые должны, вообще говоря, проявляться в области высоких давлений и высоких температур плазмы и которые не учитываются в модели Томаса – Ферми.

Учитывая вышесказанное, мы провели оптимизацию констант α_{j1} и α_{j2} и затем для полученных констант рассчитали по программе СНДП ударные адиабаты остальных веществ (жидкого D_2 , Be, Al и Au). Результаты расчетов представлены в виде $p - \rho$ -диаграмм на рис.5–8. В целом наблюдается удовлетворительное соответствие нашей модели как экспериментам, так и расчетам по модели Томаса – Ферми. Как и для железа, наибольшее отличие от модели Томаса – Ферми для выбранных элементов имеет место в области высоких давлений (более 10 Мбар), где практически отсутствуют экспериментальные данные (за исключением алюминия, рис.7). При этом в расчетах с использованием модели среднего иона хорошо проявляется оболочечная структура атомов, которая, естественно, отсутствует в приближении Томаса – Ферми.

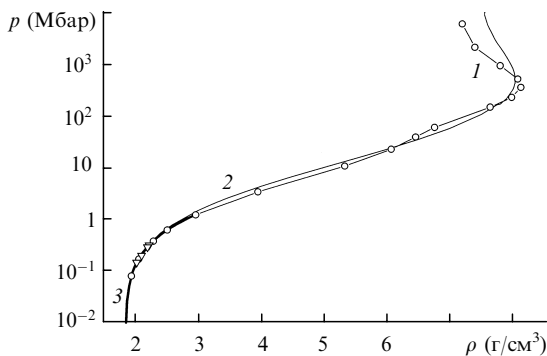


Рис.6. Ударная адиабата бериллия, рассчитанная с использованием уравнения состояния вещества по модели среднего иона (1), и результаты экспериментов [18] (∇), расчетов с использованием уравнения состояния вещества по модели Томаса – Ферми (2) и работы [1] (3).

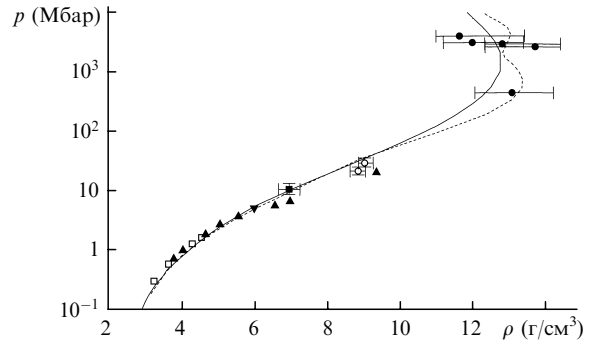


Рис.7. Ударная адиабата алюминия, рассчитанная с использованием уравнения состояния вещества по модели среднего иона (пунктир), а также результаты экспериментов Владимирова и др. (\bullet), Рагана (\square), Альтшулера и др. (\blacktriangle), Волкова и др. (\blacksquare), Кормера и др. (\blacktriangledown), Митчела и др. (\circ) (см. работу [2]) и расчетов с использованием уравнения состояния вещества по модели Томаса – Ферми (сплошная кривая).

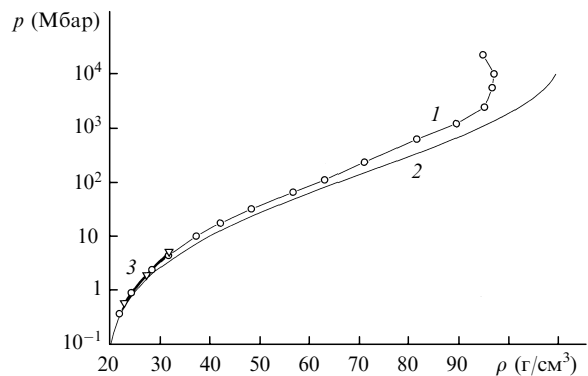


Рис.8. Ударная адиабата золота, рассчитанная с использованием уравнения состояния вещества по модели среднего иона (1), а также результаты экспериментов [1] (∇ , 3) и расчетов с использованием уравнения состояния вещества по модели Томаса – Ферми (2).

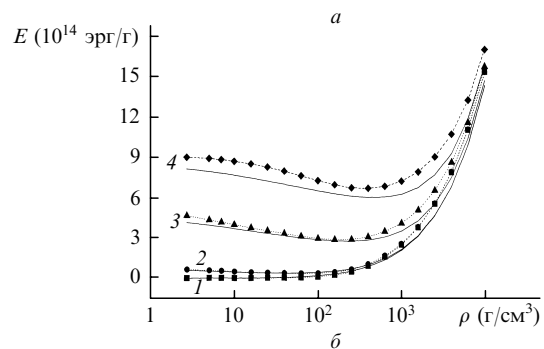
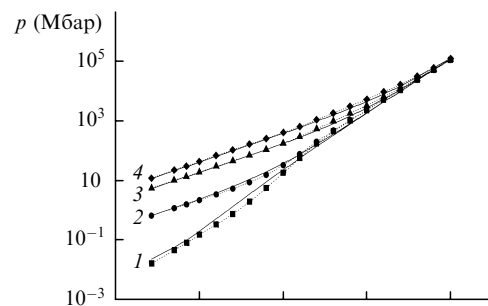


Рис.9. Зависимости $p(\rho)$ (а) и $E(\rho)$ (б) для алюминия, рассчитанные по модели среднего иона (точки) и по модели Томаса – Ферми (сплошные кривые) для $T = 10$ (\blacksquare , 1), 100 (\bullet , 2), 500 (\blacktriangle , 3) и 1000 эВ (\blacklozenge , 4).

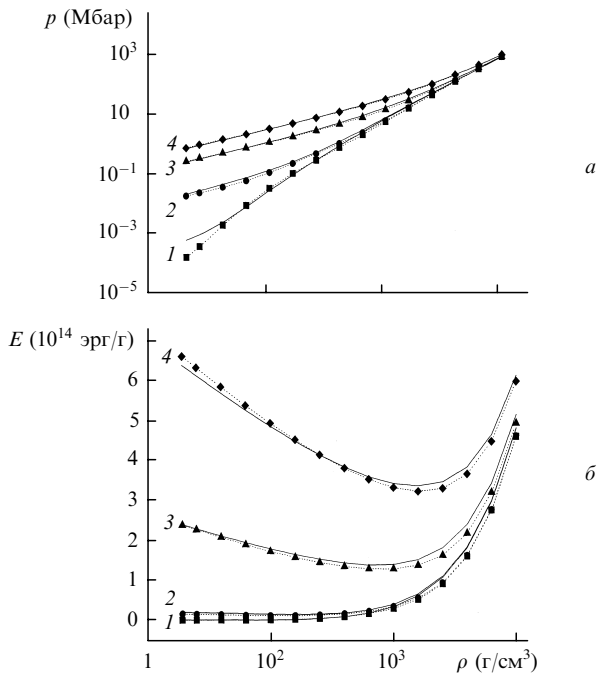


Рис. 10. Зависимости $p(\rho)$ (а) и $E(\rho)$ (б) для золота, рассчитанные по модели среднего иона (точки) и по модели Томаса – Ферми (сплошные кривые) для $T = 10$ (■, 1), 100 (●, 2), 500 (▲, 3) и 1000 эВ (◆, 4).

Как видно из рис. 5, в рамках модели среднего иона не удается описать последние данные по ударному сжатию жидкого дейтерия, полученные в экспериментах на лазерной установке NOVA [15]. В первую очередь это связано с тем, что в модели среднего иона не учитывается структура молекулы дейтерия и, следовательно, не может быть описана диссоциация молекул при ударном сжатии жидкого дейтерия. Между тем именно с диссоциацией связано резкое увеличение сжимаемости дейтерия в области давлений 1–3 Мбар (см., напр., [16]).

На рис. 9, 10 приведены изотермы алюминия и золота для $T = 0.01, 0.1, 0.5$ и 1 кэВ, полученные по модели среднего иона, а также соответствующие зависимости, рассчитанные по модели Томаса – Ферми. Наблюдается достаточно хорошее совпадение зависимостей $p(\rho)$ в обоих случаях. Что касается зависимостей $E(\rho)$ (на рис. 9, б и 10, б энергия отсчитывается от энергии вещества при твердотельной плотности и $T = 0$), то для золота совпадение является удовлетворительным, а для алюминия наблюдаются несколько большие расхождения. Так, в частности, некоторая немонотонность в зависимости $E(\rho)$ обусловлена, вероятно, оболочечными эффектами в модели среднего иона.

В целом же можно отметить, что предложенная модель уравнения состояния для кинетики ионизации в приближении среднего иона с выбором констант α_{j1} и α_{j2} для расчета статистического веса уровней при больших плот-

ностях плазмы не по «холодной» кривой ионизации, как это делалось ранее, а по «холодной» кривой энергии электронов удовлетворительно описывает поведение широкого спектра веществ (от самых легких до тяжелых) в большом диапазоне температур и плотностей.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 99-01-00919).

1. Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Трунин Р.Ф., Фортон В.Е. *Экспериментальные данные по ударной сжимаемости и адиабатическому расширению конденсированных веществ при высоких плотностях энергии* (Черноголовка, изд-е ИХФЧ, 1996).
2. More R.M., Warren K.H., Young D.A., Zimmerman G.B. *Phys. Fluids*, **31**, 3059 (1988).
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Статистическая физика* (М., Наука, 1976, т. 5, ч. 1).
4. More R.M. *J. Quant. Spectr. Rad. Transfer*, **27**, 345 (1982).
5. Бельков С.А., Гаспарян П.Д., Кочубей Ю.К., Митрофанов Е.И. *ЖЭТФ*, **111**, 496 (1997).
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика, нерелятивистская теория* (М., Наука, 1974, т. 3).
7. Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики*, № 2(6), 16 (1979).
8. Itoh M., Yabe T., Kiyokawa S. *Phys. Rev. A*, **35**, 233 (1987).
9. Бельков С.А., Долголева Г.В. *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*, №1, 59 (1992).
10. Александров А.Ф., Богданкевич Л.С., Рухадзе А.А. *Основы электродинамики плазмы* (М., Высшая школа, 1978).
11. Barnes J.F. *Phys. Rev.*, **153**, 269 (1967).
12. Альтшулер Л.В., Моисеев Б.Н., Попов Л.В., Симаков Г.В., Трунин Р.Ф. В сб.: *Свойства конденсированных веществ при высоких давлениях и температурах* (М., изд-е НИИУЭИ, 1992, с. 49).
13. Трунин Р.Ф., Подурец М.А., Симаков Г.В., Попов Л.В., Моисеев Б.Н. В сб.: *Свойства конденсированных веществ при высоких давлениях и температурах* (М., изд-е НИИУЭИ, 1992, с. 54).
14. Nellis W.J., Mitchell A.C., van Thiel M. et al. *J. Chem. Phys.*, **79**, 1480 (1983).
15. Silva L.B., Celliers P., Collins G.W. et al. *Phys. Rev. Letts*, **78**, 483 (1997).
16. Holmes N.C., Ross M., Nellis W.J. *Phys. Rev. B*, **52**, 15835 (1995).
17. Ross M., Ree F.H., Young D.A. *J. Chem. Phys.*, **79**, 1487 (1983).
18. Трунин Р.Ф., Жерноклетов М.В., Кузнецов Н.Ф., Сутулов Ю.Н. *Изв. АН СССР. Сер. Физика земли*, № 11, 65 (1987).

S.A. Bel'kov, S.V. Bondarenko, E.I. Mitrofanov. Equation of state of matter in the average-ion model for a laser-produced plasma.

A thermodynamically consistent model for calculating the equation of plasma state in the average-ion approximation is proposed. The model takes into account the chemical bonds in a solid, the pressure of electron ion shells, which arises under compression, and also the degeneracy of the electron gas at high densities and low temperatures. The calculations of shock compression of different materials, such as liquid deuterium, Al, Be, Fe and Au, carried out in the context of this model showed that it provides a satisfactory description both of the existing experimental results and of the results of calculations involving the Thomas – Fermi model over a broad range of pressure behind the shock front. A comparison was made of the isothermal lines of the above materials in the average-ion approximation and in the Thomas – Fermi model for different temperatures.