

01; 07

© 1990 г.

МЕТОД РАСЧЕТА РОССЕЛАНДОВА И ПЛАНКОВСКОГО ПРОБЕГОВ ФОТОНОВ В ПЛАЗМЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

А. Я. Полищук, В. С. Хлопонин

Предлагается новый приближенный подход к расчету оптических характеристик плотного горячего вещества, не требующий для своей реализации огромных массивов спектральных данных. Подход основан на использовании диэлектрического формализма в приближении локальной электронной плотности. Усредненные оптические характеристики в рассматриваемом приближении являются функционалами электронной плотности.

Введение

В последние годы отмечается возрождение интереса к оптическим характеристикам вещества, который в первую очередь связан с исследованиями плазмы в экстремальных состояниях, получаемой при воздействии мощных потоков энергии на вещество [1, 2]. Одним из возможных практических приложений является проблема управляемого термоядерного синтеза с инерционным удержанием [3, 4]. В плазме экстремальных состояний плотности могут существенно превышать твердотельные, а температуры могут достигать нескольких кэВ. В таких условиях излучение играет важную роль в переносе энергии и тем самым существенно влияет на гидродинамическое поведение плазмы.

Вычисление спектральных коэффициентов поглощения света с высокой точностью требует наличия огромных массивов информации по энергиям и распределению сил осцилляторов электронных переходов, знания профилей спектральных линий [5-7]. Получение и использование такой информации [5-7] требует непомерно больших вычислительных затрат при том, что возможность учета всех физических механизмов, определяющих оптические свойства плотного горячего вещества с сильным межчастичным взаимодействием, является проблематичной.

Вместе с тем проблема переноса излучения в целом ряде случаев может быть сведена к лучистой теплопроводности, т. е. к расчету средней длины пробега фотонов, усредненных по Росселанду l_R , а для оценки потерь энергии, нагретой плазмой, — по Планку (l_P) [8]. В работе [9] были предложены простые формулы для длин пробега излучения в областях, определяемых непрерывным спектром. При температурах, составляющих десятки и сотни эВ, определяющую роль играет линейчатое излучение, причем для расчета росселандова пробега необходим детальный перебор всех линий, что является очень громоздкой задачей даже при использовании современных ЭВМ. Тем не менее оказывается, что наличие большого числа перекрывающихся линий и необходимость расчета именно усредненных величин понижают требования к степени точности и детализации исходных спектральных коэффициентов поглощения [10] и даже делают вполне адекватным их модельное описание [11].

В работе [11] удалось получить близкие к [5-7] результаты, введя искусственную процедуру поэтапного уширения линий затравочного водородоподобного спектра и подбирая индивидуальный для каждого элемента подгоночный пара-

метр так, чтобы описать одновременно результаты [5-7] для росселандова и планковского пробегов.

Минимальная оценка росселандова пробега l_R^{\min} легко получается из определения l_R при использовании правила сумм для сил осцилляторов электронных переходов [12]

$$l_R^{\min} = 1.66 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{A}{Z} \cdot \frac{T}{\rho}, \quad (1)$$

где A — атомный вес, Z — заряд ядра, T — температура в кэВ, ρ — плотность в г/см³, l_R^{\min} в см.

В работе [13] формула (1) существенно улучшена за счет того, что вместо полного числа электронов, приходящихся на один атом, Z , в (1) подставляется число связанных электронов $Z - \bar{i}$ (\bar{i} — средняя степень ионизации), что обязано предположению об определяющем вкладе связанных электронов, сделанному в [13]. Тем не менее при использовании модифицированной оценки (1), предложенной в [13], ошибки могут достигать нескольких порядков величины (см. ниже).

В настоящей работе предлагается новый приближенный подход к расчету пробегов излучения, который основан на диэлектрическом формализме в приближении локальной электронной плотности.

Спектральный коэффициент поглощения и диэлектрическая проницаемость

Спектральный коэффициент поглощения света $\eta(\omega)$ на частоте ω , определенный как отношение скорости потерь энергии в единичном объеме Q к вектору Пойтинга S , может быть выражен через диэлектрическую проницаемость $\epsilon(\omega)$ следующим образом:

$$\eta(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \frac{\text{Im } \epsilon(\omega)}{\text{Re } k(\omega)}, \quad (2)$$

где c — скорость света; $k(\omega)$ — волновой вектор, связанный с диэлектрической проницаемостью соотношением:

$$k(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\text{Re } \epsilon(\omega) + i \cdot \text{Im } \epsilon(\omega)}. \quad (3)$$

Отметим, что формула (2) отличается от часто ошибочно используемого соотношения (см., например, [14]), в котором в (2) вместо $\text{Re } k(\omega)$ стоит $\omega \sqrt{\text{Re } \epsilon(\omega)}/c$.

Рассмотрим следующую модель вещества. Условно разделим электроны на две группы — связанные и свободные (конкретный способ разделения обсуждается ниже) и будем считать, что каждая группа электронов поляризуется независимо. В соответствии с этим величина отличия диэлектрической проницаемости от единицы определяется суммой двух вкладов — от связанных и свободных электронов

$$\epsilon(\omega) - 1 = 4\pi N_i \alpha_i(\omega) - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\nu(\omega)}, \quad (4)$$

где N_i — числовая концентрация ионов, $\alpha_i(\omega)$ — их динамическая поляризуемость (предполагается, что $\alpha_i N_i \ll 1$).

В области полной ионизации $\alpha_i = 0$ формула (4) превращается в общую формулу для однородного электронного газа в поле ионов, в которой $\nu(\omega)$ — динамическая частота столкновений.

Динамическая поляризуемость ионов

Рассмотрим однородную систему электронов, взаимодействующую с внешним полем $\text{Re } E e^{i\omega t}$. Соответствующий гамильтонион имеет вид

$$\hat{V} = -D \cdot \text{Re } E e^{i\omega t}, \quad (5)$$

где D — оператор дипольного момента.

Вероятность перехода из состояния i в состояние f в единицу времени равна для слабых полей (здесь и далее используется атомная система единиц)

$$w_{if} = \frac{\pi E^2}{2} (\mathbf{D}_{fi} \cdot \mathbf{s})^2 \delta(\omega - \omega_{fi}), \quad (6)$$

где \mathbf{D}_{fi} — дипольный матричный элемент между ортонормированными состояниями f и i , \mathbf{s} — единичный вектор в направлении \mathbf{E} , ω_{fi} — разность энергий конечного f и начального i состояний.

Мощность $P_a^i(\omega)$, поглощаемая электронной системой при переходе из состояния i во все возможные конечные состояния f , будет ($\omega > 0$)

$$P_a^i(\omega) = \sum_f w_{if} \cdot \omega_{fi}. \quad (7)$$

Используя координатное представление оператора \mathbf{D} , формулу (7) можно переписать в виде

$$P_a^i(\omega) = \frac{\pi E^2}{2} \sum_f \left| \langle f | \sum_n \mathbf{r}_n \cdot \mathbf{s} | i \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}) \cdot \omega_{fi}, \quad (8)$$

где n — индекс, нумерующий электроны с координатой \mathbf{r}_n .

Учитывая ортонормированность состояний и используя тождество $\mathbf{r} \cdot \mathbf{s} = q^{-1}(\mathbf{q}\mathbf{r} \cdot \mathbf{s})$, из (8) получаем

$$P_a^i(\omega) = \frac{\pi E^2}{2} \Omega^2 \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_f |\langle f | \rho(\mathbf{q}) | i \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{fi}) \cdot \omega_{fi}, \quad (9)$$

где Ω — объем системы, $\rho(\mathbf{q})$ — фурье-образ оператора плотности частиц

$$\rho(\mathbf{q}) = \frac{1}{\Omega} \int \rho(\mathbf{r}) \cdot e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (10)$$

Если нас интересует полная мощность излучения $P_a(\omega)$ с частотой ω , поглощенная системой при температуре $1/\beta$, то из (9) получаем (везде далее подразумевается предельный переход $q \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} P_a(\omega) &= \frac{\pi E^2 \Omega^2 \omega}{2q^2} \sum_{i,f} e^{-\beta(E_i - F)} \cdot \langle i | \rho(\mathbf{q}) | f \rangle \langle f | \rho(-\mathbf{q}) | i \rangle \cdot \delta(\omega - \omega_{fi}) = \\ &= \frac{\pi E^2 \Omega \cdot \omega}{q^2 (1 + e^{-\beta\omega})} S(\mathbf{q}, \omega), \end{aligned} \quad (11)$$

где мы использовали определение динамического структурного фактора электронов $S(\mathbf{q}, \omega)$ [15]. Мощность индуцированного излучения $P_e(\omega)$ на частоте ω получается аналогично (11)

$$P_e(\omega) = -P_a(-\omega). \quad (12)$$

Учитывая, что $S(\mathbf{q}, \omega) = S(\mathbf{q}, -\omega)$ и что эффективная поглощаемая мощность $P_{ef}(\omega)$ определяется разностью между истинным поглощением и эффективным испусканием, находим

$$P_{ef}(\omega) = \frac{\pi E^2 \Omega \omega}{q^2} S(\mathbf{q}, \omega) \left[\frac{1}{1 + e^{-\beta\omega}} - \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} \right]. \quad (13)$$

Формулы (11) и (13) являются обобщением результатов [16] на случай конечных температур и удовлетворяют общему соотношению

$$P_{ef}(\omega) = P_a(\omega) (1 - e^{-\beta\omega}). \quad (14)$$

Оказывается, однако, что явная температурная зависимость исчезает, если выразить (13) через диэлектрическую проницаемость

$$P_{ef}(\omega) = \frac{\omega E^2 \Omega}{8\pi} \text{Im} \frac{1}{\varepsilon(\omega)}. \quad (15)$$

Из (15) немедленно следует выражение для мнимой части поляризуемости $\alpha(\omega)$

$$\text{Im } \alpha(\omega) = \frac{\Omega}{4\pi} \text{Im} \frac{1}{\epsilon(\omega)}. \quad (16)$$

Действительную часть поляризуемости можно восстановить из дисперсионного соотношения

$$\text{Re } \alpha(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{Im } \alpha(z)}{z - \omega} dz. \quad (17)$$

В приближении однородного электронного газа (как следует из (16), (17)) поляризуемость электронной системы выражается через плотность электронов n_e .

$$\alpha(\omega) = \frac{n_e \Omega}{4\pi n_e - \omega^2 - i\omega \cdot 0}, \quad (18)$$

а в приближении локальной электронной плотности для динамической поляризуемости иона в соответствии с (18) получаем

$$\alpha_i(\omega) = \int \frac{n_e(\mathbf{r})}{4\pi n_e(\mathbf{r}) - \omega^2 - i \cdot \omega \cdot 0} d\mathbf{r}, \quad (19)$$

где $n_e(\mathbf{r})$ — распределение электронной плотности в ионе.

Как следует из вышеизложенного, формула (19) в рассматриваемом приближении справедлива при конечных температурах и тем самым учитывает процессы индуцированного испускания.

Интерполяционная формула для динамической частоты столкновений и тормозного спектра

В плазме при высоких температурах или плотностях заряд ионов $Z_i > 1$, поэтому величина частоты столкновений $\nu(\omega)$ определяется в основном рассеянием электронов на ионах (для вырожденных электронов межэлектронное рассеяние подавляется из-за принципа Паули).

В работе [17] реализована сшивка асимптотических результатов для тормозного спектра классической [8] и вырожденной плазмы для больших частот ($\omega \gg \omega_p$) с интерполяционной формулой для статической проводимости ($\omega \ll \ll \omega_p$) газовой и металлической плазм. В результате получается следующая широкодиапазонная формула, приближенно справедливая для всех значений входящих в нее величин,

$$\nu(\omega) = \frac{2\pi^2 Z_i^2 N_i}{3\omega \sqrt{\epsilon_{ef}}} (1 - e^{-(3\omega/2\epsilon_{ef})}) G(\epsilon_{ef}, \omega) \cdot S(0), \quad (20)$$

где Z_i — заряд ионов; эффективная энергия определяется интерполяционным соотношением $\epsilon_{ef} = (3/2)T + \epsilon_F$ (ϵ_F — энергия Ферми); $S(0)$ — структурный фактор ионов при нулевой передаче импульса, качественно учитывающий влияние корреляции ионов на процесс рассеяния.

Для фактора Гаунта $G(\epsilon_{ef}, \omega)$ имеет место формула

$$G(E, \omega) = G_0 \cdot \ln \left[\frac{\tilde{\epsilon} Z_i + \sqrt{E}}{Z_i + \sqrt{E}} + \left(\frac{b_{\max}}{b_{\min}} \right)^\alpha \right], \quad (21)$$

где

$$G_0 = 1 - \frac{7}{8} \frac{\sqrt{3} \omega_p}{4\omega + \sqrt{3} \omega_p},$$

$$\alpha = \frac{1}{2} + \frac{7}{2} \frac{\sqrt{3} \omega_p}{4\omega + \sqrt{3} \omega_p}, \quad \tilde{\epsilon} = 1 + (e - 1) \frac{4\omega}{4\omega + \sqrt{3} \omega_p}.$$

Максимальный b_{\max} и минимальный b_{\min} прицельные параметры определяются через длину Ландау $l = Z_i / \varepsilon_{ef}$, длину волны электрона $\lambda = 1 / \sqrt{8\varepsilon_{ef}}$, дебаевский радиус $d_s = \sqrt{\frac{2}{3} \varepsilon_{ef}} / \omega_p$ и среднее межэлектронное расстояние a

$$b_{\min} = l + \lambda, \quad b_{\max} = \min \left\{ \frac{v_{ef}}{4\omega}, d_s \right\}, \quad \bar{d}_s = d_s + a + l \frac{i}{l + \lambda}.$$

Интерполяционная формула для модифицированного «дебаевского радиуса» \bar{d}_s учитывает ограничение на длину экранирования в сильно неидеальной плазме ($\bar{d}_s \ll a$) и особенность классического рассеяния на экранированном потенциале, связанную с тем, что кулоновский логарифм ограничен снизу некоторой константой порядка единицы при $d_s, a \ll l$ [18]. Формулы (20), (21) удовлетворительно описывают проводимость и тормозной спектр как газовой, так и металлической плазм при любых температурах [17] (для расчета ионизационного равновесия при этом используется широкодиапазонная аналитическая формула, позволяющая оценить степень ионизации в любой точке фазовой плоскости [19]).

Результаты расчетов и обсуждение

Ионизационное равновесие в плотной горячей плазме рассчитывалось в рамках ячейечной модели и градиентной формулировки метода функционала плотности при конечных температурах [18]. Концентрация свободных электронов

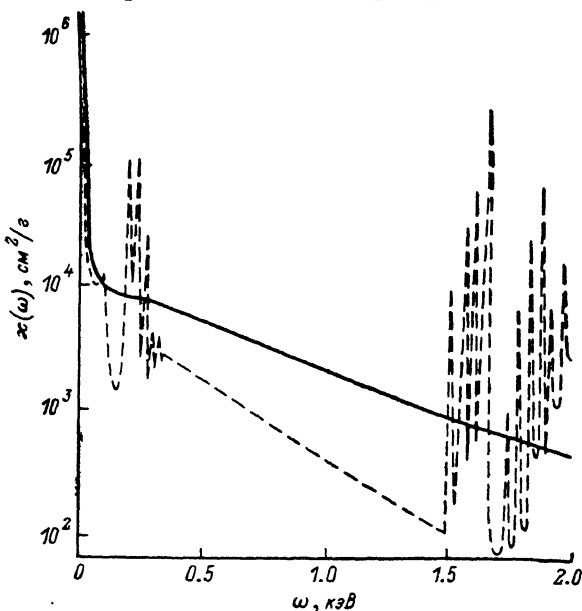


Рис. 1. Зависимость коэффициента поглощения для Al ($Z=13$) от частоты при $T=100$ эВ и $\rho=0.187$ г/см³.

Штриховые кривые — детальный спектр по данным [5].

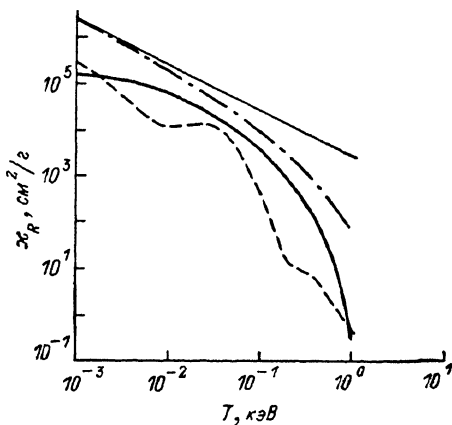


Рис. 2. Зависимость росселандова коэффициента поглощения для Al ($Z=13$) от температуры при $\rho=0.1$ г/см³.

Штриховая кривая — результаты [5-7], штрихпунктир — расчет по модели [18], прямая линия — оценка по формуле (1).

оценивалась по значению электронной плотности $n(R)$ на границе ячейки радиуса R . Распределение электронной плотности в ионе определялось из соотношения

$$n_+(r) = n(r) - n(R).$$

На рис. 1 сравнивается детальный спектр эффективного коэффициента поглощения $x(\omega) = \eta(\omega) / \rho$ в алюминии (по данным Лос Аламосской Национальной

лаборатории США [5]) с оценкой по формуле (4). Полученная оценка, как видно из рисунка, обеспечивает усредненное описание спектра, что в конечном итоге приводит к разумным результатам для длины пробега фотонов.

На рис. 2 приводятся результаты расчета для Росселандова коэффициента поглощения κ_R (усреднение $\kappa(\omega)$ по Росселанду) в плазме алюминия при фиксированной плотности вещества для различных температур. Здесь производится

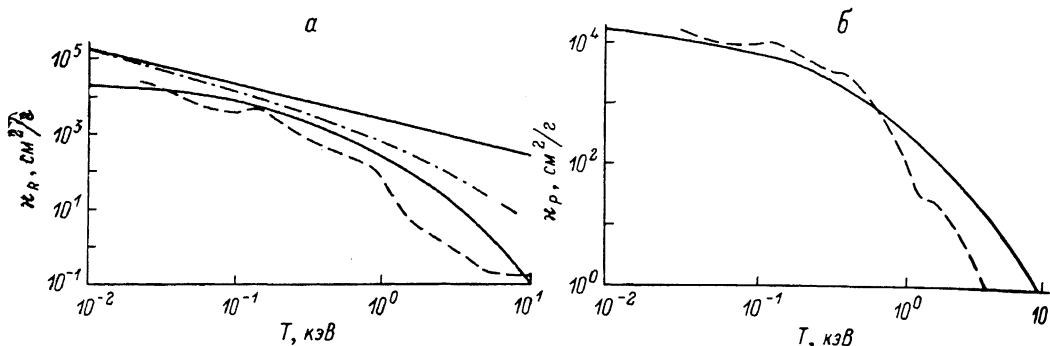


Рис. 3. Зависимость Росселандова (а) и планковского (б) коэффициентов поглощения для Au ($Z=79$) от температуры при $\rho=0.1$ г/см³.

Штриховые кривые — результаты [11], штрихпунктир — расчет по модели [13], прямая линия — оценка по формуле (1).

сравнение с результатами [5-7]. Как видно, предложенный в работе подход существенно лучше описывает результаты детального расчета [5-7], чем модель [13].

На рис. 3 представлены результаты расчета для коэффициентов поглощения, усредненных по Росселанду κ_R и по Планку κ_P , для плазмы золота в зависимости от ее температуры. Эти результаты сравниваются с полученными в [11], которые в свою очередь близки к результатам [5-7].

Выводы

Предложена физическая модель, позволяющая с удовлетворительной точностью рассчитывать длины пробегов фотонов в плотной горячей плазме в широком диапазоне параметров без использования спектральной информации. В этом смысле усредненные оптические характеристики в рассматриваемом приближении являются функционалами электронной плотности.

Авторы благодарны В. Е. Фортову за поддержку работы.

Список литературы

- [1] Анисимов С. И., Прохоров А. М., Фортов В. Е. // УФН. 1984. Т. 142. № 3. С. 395—431.
- [2] Proc. 2nd Int. Conf. / Ed. J. Davis, Ch. Hooper, R. Lee et al. Sarasota, 1983.
- [3] Физика высоких плотностей энергии / Под ред. П. Кальдиролы, Г. Кноффеля. М.: Мир, 1974.
- [4] Проблемы лазерного термоядерного синтеза / Под ред. Л. А. Филюкова. М.: Атомиздат, 1976.
- [5] Huebner W. F., Merts A. L., Magee N. H. et al. Astrophysical opacity library. Los Alamos Scientific Laboratory Manual. LA-6760-M. Los Alamos, 1977.
- [6] SESAME'83, Report on the Los Alamos equation-of-state Library. T4-Group. Los Alamos National Laboratory Report. N LALP-83-4. Los Alamos. N. M., 1983.
- [7] Huebner W. F. Atomic and Radiative Processes in the Solar Interior. Los Alamos National Laboratory Report. LA-UR-81-2347. Los Alamos, N. M., 1981.
- [8] Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1963. 632 с.
- [9] Райзер Ю. П. // ЖЭТФ. 1959. Т. 37. Вып. 3. С. 1079—1090.
- [10] Драгалов В. В., Никифоров А. Ф., Ноговио В. Г., Уваров В. Б. Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша. М., № 142. 1988.
- [11] Tsakiris G. D., Eidmann K. // J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer. 1987. Vol. 38. N 5. P. 353—368.

- [12] *Armstrong B. H., Nicholls R. W.* Emission, Absorption and Transfer of Radiation in Heated Atmospheres. Oxford: Pergamon Press, 1972.
- [13] *Имшенник В. С., Михайлов И. Н., Баско М. М., Молодцов С. В.* // ЖЭТФ. 1986. Т. 90. Вып. 5. С. 1669—1679.
- [14] *Давыдов А. С.* Теория твердого тела. М.: Наука, 1976. 640 с.
- [15] *Ишимару С.* Основные принципы физики плазмы. М.: Атомиздат, 1975. 280 с.
- [16] *Лундквист С.* // Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М.: Мир, 1987. С. 151.
- [17] *Полищук А. Я.* Препринт ИВТАН. № 1-257. М., 1988. 36 с.
- [18] *Lee Y. T., More R. M.* // Phys. Fluids. 1984. Vol. 27. N 5. P. 1273—1286.
- [19] *Polishchuk A. Ya.* // Sol. St. Commun. 1987. Vol. 61. N 3. P. 193—194.

Институт высоких температур АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
5 июня 1989 г.
