

- [5] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика, М.: Наука, 1988.
- [6] Гапонов А.В., Миллер М.А. // ЖЭТФ, 1958. Т. 34. С. 242.
- [7] Lippman В.А. // Phys. Rev. A. 1986. V. 34. P. 638.
- [8] Prosnitz D., Szoke A., Neil V.K. // Phys. Rev. A. 1981. v. 24. P. 1436.
- [9] Sprangle P., Ting A., Tang C.M. // Phys. Rev. A. 1987. V. 36. P. 2773.

Научно-исследовательский
институт ядерных проблем
при Белорусском государственном
университете им. В.И. Ленина

Поступило в Редакцию
22 ноября 1988 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 2

26 января 1989 г.

01; 04

МЕТОДИКА РАСЧЕТА СТЕПЕНИ ИОНИЗАЦИИ ТЕПЛО- И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПЛАЗМЫ В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ПЛОТНОСТЕЙ И ТЕМПЕРАТУР

И.М. Беспалов, А.Я. Полищук

Большинство задач, связанных с интерпретацией экспериментальных данных и численным моделированием физических процессов при воздействии мощных потоков энергии на вещество, требует расчета переносных свойств плазмы в очень широком диапазоне плотностей и температур, включающем слабо исследованную область экстремальных состояний.

При этом, учитывая необычные требования к широте диапазона параметров состояния и погрешность гидродинамических расчетов, предъявляются умеренные требования к точности вычисления транспортных коэффициентов. Однако временные затраты на параллельное вычисление транспортных коэффициентов по наиболее удачным моделям [1-4] неприемлемо велики, а использование таблиц часто оказывается не удобным. Поэтому крайне необходимо представление результатов расчета в аналитическом виде. В настоящей заметке сообщается о построении аналитических формул для среднего заряда ионов и переносных коэффициентов плазмы элементов периодической системы в диапазоне плотностей $10^{-4} \text{ г/см}^3 < \rho < 10^2 \text{ г/см}^3$ и температур $10^2 \text{ К} < T < 10^7 \text{ К}$.

Для расчета состава плазмы авторами была предложена модель на основе системы уравнений типа Саха:

$$n_i n_e^{-1} n_{i+1}^{-1} = W_i(\rho, T) K(\rho, T), \quad (1)$$

где n_e , n_i – концентрации электронов и ионов кратности i .

При вычислении стандартной константы равновесия $K(\rho, T)$ электронные неидеальность и вырождение учтены в (1) в духе результатов [5–9] для однородного электронного газа, а поправки на ион-ионное взаимодействие рассчитывались в рамках дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле.

Для описания эффекта ионизации давлением – перехода металл-диэлектрик (МД) – в уравнения ионизационного равновесия вводится функция $W_i(\rho, T)$, вид которой был выбран в соответствии с критерием Лифшица [10], согласно которому переход МД наступает при условии $R = a_i^0 = C I_i^{-1/2}$, где R – среднее расстояние между ядрами, а a_i^0 – диаметр электронной орбиты i -того связанного электрона.

$$W_i(\rho, T) = F(\chi_i(\rho, T)) = (1 + \exp(-2\chi_i))^{-1}, \quad \chi_i = (R - a_i^0) \delta^{-1} (a_i^0)^{-1},$$

$$\delta = \delta_0 (T/T_{cs}) (I_{cs}/I), \quad R = (3/4\pi n)^{1/3}, \quad (2)$$

где n – концентрация ядер, I_{cs} и T_{cs} – первый потенциал ионизации и критическая температура Cs . Константы $\delta_0 = 0.02$ и $C = 4.8$ найдены путем сравнения с экспериментальными данными в области перехода МД в Cs [11]. Проверка универсальности $W_i(\rho, T)$ показывает, что при расчете по (1), (2) в большинстве жидких и газообразных диэлектриков число свободных электронов равно нулю, а в металлах при нормальных условиях – числу валентных электронов.

Таким образом, предложенная модель позволяет рассчитать состав плазмы во всем интересующем нас диапазоне практически для всех элементов Периодической системы.

Проведенные расчеты позволяют предложить для среднего заряда ионов $Z(\rho, T)$ аппроксимационную формулу следующего вида: $Z(\rho, T) = \max(Z_1, Z_2)$, где физический смысл функций Z_1 и Z_2 состоит в преимущественном описании двух основных эффектов соответственно: температурной ионизации и ионизации давлением. Перейдем для удобства к переменным $r = \log_{10} \rho$, $t = \log_{10} T$, ρ – в г/см³, T – в К. Функцию $Z_2(\rho, T)$ выберем в виде:

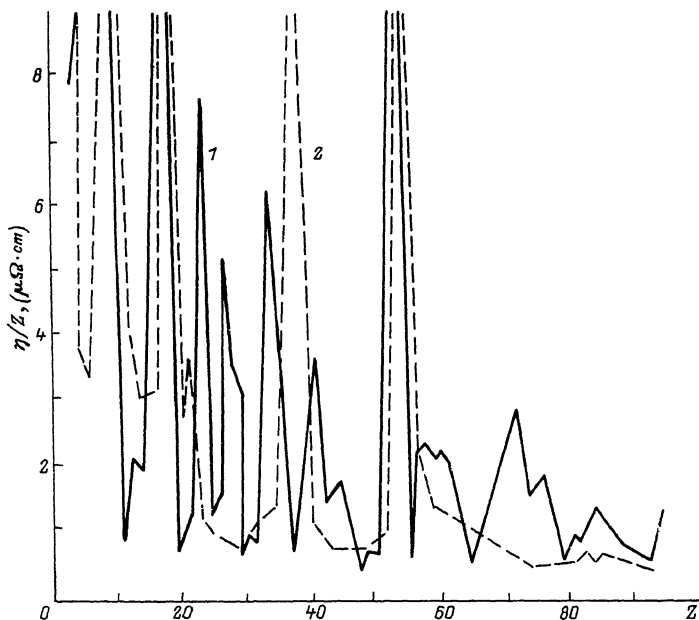
$$Z_2(\rho, T) = \sum_{n=1}^N F((r - r_n + \varepsilon(t - \tau)) / \beta t),$$

$$r_n = \log_{10} (A D I_n^{3/2}), \quad (3)$$

где I_n – n -й потенциал ионизации (в эВ), $D = 4.2 \cdot 10^{-4}$, A – атомный вес, N – заряд ядра. Функцию $Z_1(\rho, T)$ выберем в виде:

$$Z_1(\rho, T) = \sum_{k=1}^N F(\chi), \quad \chi = (t - t(r, k)) / (\alpha t(r, k)), \quad (4)$$

$$t(r, k) = t_0(k) + \gamma(r - r_0).$$



1 - эксперимент [15], 2 - настоящая работа.

Коэффициенты в (3) и (4) найдены путем подгонки под результаты непосредственного расчета по описанной выше „обобщенной химической модели“ для *Cu*. В результате получены следующие значения: $\alpha = 0.05$, $\beta = 0.05$, $\gamma = 0.125$, $r_0 = -4$, $t_0(k) = 0.1I_k$, $\tau = 2$, $\epsilon = 0.075$. Выборочной проверкой установлено, что данная аппроксимация хорошо работает для *Al*, *Pb*, *Xe*, *Ag*, *Ne*, *Fe*, *Cs*, *Hg* и, по-видимому, может рассматриваться как универсальная в рамках данной модели. Область слабой ионизации ($Z < 10^{-3}$) данные формулы не описывают.

Расчет переносных коэффициентов может быть произведен с помощью модели, основанной на решении КУ Больцмана в τ -приближении для Лоренцевского газа, которое дает:

$$\sigma = n_e e^2 \tau^{\sigma} / m, \quad \alpha = n_e k^2 T \tau^{\alpha} / m, \quad (5)$$

$$\tau^{\sigma, \alpha} = A^{\sigma, \alpha} \frac{m^{1/2} (1.5kT + E_f)^{3/2} \bar{f}_e(Z)}{Z^2 n_i e^4 \ln \lambda S(0)} \left(1 - \frac{B^{\sigma, \alpha} kT}{kT + E_f} \right)^{-1},$$

Сравнение результатов расчета электропроводности σ и AL с экспериментальными данными [14] ($\text{Ом}^{-1} \text{см}^{-1}$)

	T (К)	ρ ($\text{г}/\text{см}^3$)	Эксперимент	Расчет
Cu	1356	8.00	$5.21 \cdot 10^4$	$3.9 \cdot 10^4$
	2500	7.09	3.86 —"	1.9 —"
	3500	6.42	3.09 —"	1.2 —"
Al	933	2.42	3.83 —"	2.6 —"
	2000	2.18	2.50 —"	1.2 —"
	3000	1.97	1.79 —"	0.7 —"
	4000	1.78	1.83 —"	0.3 —"

σ и α — электро- и теплопроводность, m — масса электрона, E_f — энергия Ферми, e — заряд электрона, k — постоянная Больцмана. Входящий в (5) кулоновский логарифм определяется как:

$$\ln \lambda = 0.25 \ln (1 + [4\pi \max(d, R) / (\Lambda + \xi(T_f, T) l)]^4),$$

$$\xi(T_f, T) = T / (T_f + T), \quad (6)$$

где d — дебаевский радиус, l — расстояние наибольшего сближения электрона с ионом, Λ — длина волны электрона, T_f — температура Ферми, R — среднее межчастичное расстояние; входящие в (5) константы равны: $A^\sigma = 0.22$, $A^\alpha = 0.74$, $B^\sigma = 0.6$, $B^\alpha = 0.66$.

Структурный фактор для нулевой передачи импульса был взят в соответствии с оценками теории кристаллической решетки и критерием Линдемана для плавления с учетом исчезновения ионной корреляции при высоких температурах:

$$S(q) \cong S(0) - 2/3 \cdot 0.04 T / (2/3 \cdot 0.04 T + T_{\text{melt}}), \quad (7)$$

где T_{melt} — температура плавления, зависящая от плотности и вычисляемая в соответствии с теорией однокомпонентной плазмы. Фактор $\bar{r}(Z)$ учитывает вклад электрон-электронного рассеяния [13] с обобщением на случай вырождения:

$$r(Z) = \frac{3\pi}{32} \left[1 + \frac{153Z^2 + 509Z}{64Z^2 + 345Z + 288} \right], \quad (8)$$

$$\bar{r}(Z) = r(Z) + (1 - r(Z)) [T_f^2 / (T_f^2 + T)].$$

Сравнение полученных результатов с экспериментальными данными по удельному сопротивлению $\eta = 1/\sigma$ элементов в жидком состоянии в точке плавления и расширенных металлов приведено соответственно на рисунке и в таблице. Несмотря на расхождения, данный расчет значительно превосходит по точности уже имеющиеся

[3], где расхождение с экспериментом в целом ряде случаев достигает 8 порядков.

Предложенная схема расчета не учитывает наличие двухфазной области, внутри которой она дает усредненный ответ. Рассеяние на нейтралах может быть учтено по формуле Фроста.

Авторы благодарны В.Е. Фортову за внимание и поддержку, и Г.А. Шнейерсону, в беседе с которым возникла идея построения аналитической формулы.

Л и т е р а т у р а

- [1] Lee Y.T., More R.M. // *Phys. Fluids*. 1984. V. 27. P. 1273.
- [2] Ichimaru S., Mitake S., Tanaka S., Yan X.-Z. // *Phys. Repts.* 1987. V. 149. P. 91.
- [3] Rinker G. Los-Alamos report LA-9872-MC, 1984; Los-Alamos report LA-10404-MS, 1985.
- [4] Rinker G. // *Phys. Rev.* 1988, v. A37. P. 1284.
- [5] Ceperley D.M., Alder B.J. // *Phys. Rev. Lett.* 1980. V. 45. P. 566.
- [6] Vosko S.H., Wilk L., Nusair M. // *Can. J. Phys.* 1980. V. 58. P. 1200.
- [7] Perrot F., Dharmawardana M.W.C. // *Phys. Rev.* 1984. V. 30A, P. 2619.
- [8] Grimaldi F., Grimaldi-Lescourt A. Dharmawardana M.W.C. // *Phys. Rev.*, 1985. V. 32A. P. 1063.
- [9] Полишук А.Я. Препринт ИВТАН 1-197, 1986.
- [10] Эфрос А.Л. // *УФН*. 1978. Т. 12. С. 41.
- [11] Hensel F. // *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* 1976. V. 80. S. 786.
- [12] Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир, 1974.
- [13] Van Odenhoven F.J.F., Schvamm P.P.J.M. // *Physica*, 1985, V. 133A, P. 74.
- [14] Gatherers G.R. // *Int. J. Thermophys.* 1983. V. 4. P. 209.
- [15] Wilson J.R., // *Metallurgical Reviews*. 1965. V. 10. P. 381; Brandes E.A. Ed., *Smithells Metals Reference Book*, Sixth edition, 1983, London, (Butteworth and Co).

Поступило в Редакцию
22 ноября 1988 г.