

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Л. Хомкин, К расчету термодинамических функций, состава и электропроводности плазмы инертных газов,
ТВТ, 1978, том 16, выпуск 1, 37–42

<https://www.mathnet.ru/tvt8334>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.86

25 мая 2025 г., 07:59:27



УДК 533.932

К РАСЧЕТУ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ, СОСТАВА И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ ПЛАЗМЫ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ*Хомкин А. Л.*

Изложена методика расчета термодинамических функций, равновесного состава и электропроводности слабонеидеальной частично ионизованной плазмы инертных газов (Ar, Xe, Kr) и водорода. При расчете состава и электропроводности приняты во внимание слабосвязанные комплексы — квазисвязанные состояния и столкновительные комплексы. Приводятся необходимые для расчетов величины статсумм, транспортных сечений и др. Названные выше свойства рассчитаны при 15 атм и 10 000—20 000 К. Проводится сопоставление с экспериментом.

В настоящее время можно считать надежно установленным [1–3], что в условиях умеренной кулоновской неидеальности, $\alpha \leq 1$ ($\alpha = \beta e^2 / r_D$, β — обратная температура, r_D — дебаевский радиус) наилучшие результаты для термодинамических функций дает теория, основанная на разложении последних в ряд по степеням активности в большом каноническом ансамбле [4, 5]. Эта теория хорошо описывает область состояний плазмы от полной ионизации до состояний полной или частичной ассоциации зарядов в нейтральные атомы.

Измерения электропроводности плазмы инертных [6–10] и других газов [11–15] демонстрируют систематическое расхождение экспериментально измеренной величины электропроводности с расчетом, выполненным для идеальной плазмы.

Для объяснения этого расхождения в [16, 17] было введено понятие о слабосвязанных электрон-ионных (ЭИ)-парах в плазме. Эти пары имеют как отрицательную, так и положительную энергию связи, причем в общем количестве преобладают последние. ЭИ-пары с положительной энергией связи — состояния, возникающие при рассеянии электрона на ионе и соответствующие электрону, находящемуся в некоторой окрестности точки поворота траектории рассеяния. Такие состояния иногда называют столкновительными комплексами (СК). В [16, 17] были получены формулы для расчета равновесного состава таких пар, исследована их роль в процессе электропереноса.

Оказывается, что при умеренной кулоновской неидеальности в заряженной подсистеме СК и квазисвязанные состояния (КС) (состояния с малыми отрицательными энергиями связи) при расчете электропроводности играют роль, подобную высоковозбужденным атомам: они являются рассеивателями для электронов проводимости, собственный же их вклад в электроперенос (движение электрона в КС и СК инфинитно) мал.

Расчет электропроводности плазмы аргона при давлении $P=15$ атм и температуре $T \sim 10\,000$ – $20\,000$ К, выполненный с учетом КС и СК, хорошо согласуется с экспериментами [16].

В данной работе подробно излагается методика расчета термодинамических функций, состава и электропроводности плазмы инертных газов с учетом кулоновской неидеальности, КС и СК. Приводятся простые расчетные формулы, необходимые величины статсумм и аппроксимация

транспортных сечений рассеяния электрона на атомах Ar, Xe, Kr и H. Рассчитаны термодинамические функции, состав и электропроводность при давлении $P=15$ атм и температуре $T=10\,000-20\,000$ К. Проведенное сравнение с экспериментами показывает хорошее согласие расчета и эксперимента в широкой области параметров.

Термодинамические функции. Рассмотрим плазму при температуре $T=1/\beta$, с полным числом тяжелых частиц $N_i=N_e=N$. Тогда для концентрации $n=N/V$ и давления P имеют место соотношения

$$n = z_e \left(1 + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{4} + z_i \Lambda_e^3 \Sigma_{\Pi} \right), \quad (1)$$

$$\beta P = z_e \left(2 + \frac{2\alpha}{3} + \frac{\alpha^2}{4} + z_i \Lambda_e^3 \Sigma_{\Pi} \right). \quad (2)$$

В (1), (2) z_e, z_i — активности (величины, близкие к концентрациям свободных зарядов); $\Lambda_e^3 = \hbar^3 \beta^{3/2} / (2\pi m)^{3/2}$ — тепловая длина волны де-Бройля; Σ_{Π} — статсумма Планка; $\alpha = \beta e^2 \kappa$ — плазменный параметр, $\kappa^2 = 4\pi \beta e^2 (z_e + z_i)$. Если мы пренебрежем коллективными эффектами, т. е. положим $\alpha = 0$, то для величин n и P получаются результаты, которые дает трехкомпонентная модель плазмы. В этом случае активности z_i и z_e — концентрации свободных электронов и ионов.

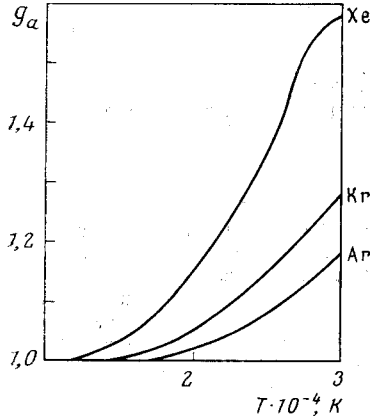


Рис. 1. Статистический вес атомов инертных газов

Уравнения (1) и (2) учитывают влияние кулоновской неидеальности в заряженной подсистеме и дают разложения термодинамических величин с точностью до z^2 . Для конкретных расчетов запишем формулы (1) и (2) в виде

$$n = z_e \left(1 + \sqrt{z_e} \frac{A}{T^{3/2}} + z_e \frac{A^2}{T^3} + z_i \frac{B e^{I/T} g_a}{2 g_i T^{3/2}} \right), \quad (3)$$

$$P = 1,6 \cdot 10^{-18} T z_e \left(2 + \sqrt{z_e} \frac{4A}{3 T^{3/2}} + z_e \frac{A^2}{T^3} + z_i \frac{B e^{I/T} g_a}{2 g_i T^{3/2}} \right), \quad (4)$$

в (3) и (4) концентрации n и z следует подставить в см^{-3} ; I — энергия связи основного состояния; g_a, g_i — статвеса атома и иона; $A = 1,37 \cdot 10^{-10}$; $B = 3,31 \cdot 10^{-22}$; давление P — в атм. Здесь и в дальнейших формулах T — температура в эВ.

Статвеса атомов инертных газов рассчитываются по соотношению

$$g_a = e^{-I/T} \sum_{n=0}^{\infty} g_n (e^{\beta E_n} - 1 - \beta E_n), \quad \text{где } g_n \text{ — статвеса состояний с главным квантовым числом } n; E_n \text{ — энергия связи.}$$

Результаты расчета представлены на рис. 1.

Статвеса ионов g_i рассчитывались с учетом первого возбужденного состояния по соотношению

$$g_i = g_0 + g_1 e^{-\Delta/T}.$$

Величины g_0, g_1 и Δ представлены в табл. 1.

Рассмотрим пример. Найдем полную концентрацию тяжелых частиц для плазмы аргона при давлении $P=15$ атм и температуре $T=16\,000$ К. Подставляя в (4) $g_a=1$ и $g_i=5,76$, определяем величину z_e . Для этого необходимо решить уравнение (4) относительно неизвестного z_e . Получаем $z_e = 1,49 \cdot 10^{18}$. Теперь нетрудно определить из (3) полную концентрацию $n = 5,26 \cdot 10^{18}$. Таким образом, зная две из величин P, n, T , легко

найти одну неизвестную, т. е. получить уравнение состояния. Заметим, что при такой методике расчета термодинамических функций нам не требуется вводить какое-либо обрезание статсуммы атома и снижение потенциала ионизации.

Равновесный состав. В [16, 17] коррелированные электрон-ионные пары в плазме разбиты на четыре группы: атомы (А), возбужденные атомы (ВА), квазисвязанные состояния (КС) и столкновительные комп-

Таблица 1

АТОМ	a	b	c	d	f	I, эВ	g ₀	g ₁	Δ
Ar	8,05	28,024	0,99	1,743	0,136	15,76	4	2	0,18
Kr	30,7	11,6	0,79	2,06	0,15	14,00	4	2	0,67
Xe	108,41	14,5	3,456	1,83	0,191	12,13	4	2	1,3
H	0	0	26,93	-0,56	-0,02	13,595	2	0	0

лексы (СК). Концентрации всех этих компонент выражаются через плотность их внутренних состояний $g(E)$, имеющей вид [16]

$$g(E) = z_i \int \frac{dP dR}{(2\pi\hbar)^3} F(R) \left[\delta\left(E - \frac{P^2}{2m} + \frac{e^2}{R}\right) - \delta\left(E - \frac{P^2}{2m}\right) \right]. \quad (5)$$

Здесь P , R — импульс и координата внутреннего движения, $F(R) = \exp[-4\pi R^3(z_e + z_i)/3]$ — плотность вероятности того, что электрон, ближайший к данному иону, находится на расстоянии R от него. Фактически это означает, что мы рассматриваем электрон-ионные пары размером $R < R_{cp}$ (среднее расстояние между зарядами).

В [17] получены формулы для расчета концентраций пар (А, ВА, КС и СК) интегрированием плотности состояний $g(E)$ с бoльцмановской экспонентой по соответствующему интервалу энергий.

Для расчета электропроводности необходимо знание n_A , концентрации слабосвязанных пар $n^* = n_{ВА} + n_{КС} + n_{СК}$ и концентрации свободных электронов $n_e^f = n - n_A - n^*$

$$n_A = z_e z_i \Lambda_e^3 e^{\beta I} \cdot g_a / 2g_i = 3,31 \cdot 10^{-22} z_e z_i e^{\beta I} \cdot g_a / 2g_i T^{3/2}, \quad (6)$$

$$n^* = z_e (0,47\alpha^{2/3} + 0,33\alpha^{4/3}) = z_e [1,98 \cdot 10^{-7} (z_e^{1/2}/T) + 5,83 \cdot 10^{-14} (z_e^{2/3}/T^2)], \quad (7)$$

$$n_e^f = z_e \left(1 + \frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{4} - 0,47\alpha^{2/3} - 0,33\alpha^{4/3} \right) =$$

$$= z_e \left(1 + 1,37 \cdot 10^{-10} \frac{\sqrt{z_e}}{T^{3/2}} + 4,88 \cdot 10^{-20} \frac{z_e}{T^3} - 1,98 \cdot 10^{-7} \frac{z_e^{1/2}}{T} - 5,83 \cdot 10^{-14} \frac{z_e^{2/3}}{T^2} \right). \quad (8)$$

Расчет уравнения состояния по соотношениям (3) и (4) дает, как уже отмечалось, величины P , n , T и z_e . Это позволяет легко рассчитать необходимые концентрации n_A , n^* и n_e^f , зависящие от T и z_e .

Электропроводность. Под действием внешнего электрического поля вклад в электропроводность дают как свободные электроны n_e^f , так и электроны из КС и СК. Последние определяют так называемый столкновительный перенос, который связан с относительным движением электрона в комплексе.

Вклад свободных электронов рассчитаем по формуле типа интерполяционной формулы Фроста, в которой учтем столкновения электронов со свободными ионами $n_i^f = n_e^f$, атомами n_A и слабосвязанными парами n^* . Электрон-электронные соударения в интерполяционной формуле Фроста

учитываются введением спитцеровского множителя $\xi=1,72$. Точность такой интерполяции подробно обсуждается в [18, 19]. Оказывается, что для реализующихся в наших условиях зависимостей транспортного электрон-атомного сечения рассеяния от скорости она не хуже 10%.

Принимая сечение рассеяния электронов на n_A равным сечению рассеяния на атомах в основном состоянии $\sigma_{eA}(\varepsilon)$, и сечение рассеяния на КС и СК равным резерфордскому $\sigma_{ei}(\varepsilon)$, получим для электропроводности свободных электронов n_e^f выражение

$$\sigma^f = \frac{4e^2\beta^{3/2}n_e^f}{3(2\pi m)^{1/2}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} d\varepsilon}{[n_A\sigma_{eA}(\varepsilon) + (n_i^f + n^*)\xi\sigma_{ei}(\varepsilon)]}, \quad (9)$$

где

$$\sigma_{ei}(\varepsilon) = \frac{650\text{Å}^2}{\varepsilon^2 \ln \Lambda}; \quad \Lambda = \frac{3\sqrt{2}}{\alpha} = 1,55 \cdot 10^{10} \frac{T^{3/2}}{\sqrt{z_e}},$$

а для $\sigma_{eA}(\varepsilon)$ воспользуемся аппроксимацией [9, 15], которая вплоть до энергий ~ 10 эВ с точностью не хуже 10% описывает экспериментальные зависимости требуемых сечений

$$\sigma_{eA}(\varepsilon) = [ae^{-b\varepsilon} + ce^d e^{-f\varepsilon}] \text{Å}^2.$$

В $\sigma_{eA}(\varepsilon)$ и $\sigma_{ei}(\varepsilon)$ энергия налетающего электрона выражена в эВ. Коэффициенты приведены в табл. 1.

Приведем формулу (9) к виду, удобному для конкретных расчетов

$$\sigma^f = \sigma_s [n_e^f / (n_i^f + n^*)] Y. \quad (10)$$

В (10) σ_s — спитцеровское значение электропроводности

$$\sigma_s = 191 T^{3/2} / \ln \Lambda.$$

Величина Y описывает влияние столкновений электронов с атомами и в пределе полной ионизации стремится к 1. Таким образом, как указано в [16], при высокой ионизации плотностная поправка к спитцеровскому значению электропроводности определяется дополнительными столкновениями свободных электронов и слабосвязанных ЭИ-пар (т. е. описывается фактором $n_e^f / (n_i^f + n^*)$). Приведем удобное для расчетов выражение для Y

$$Y = \frac{1}{6T^2} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3 e^{-\varepsilon/T} d\varepsilon}{\{1 + 0,89 \cdot 10^{-3} n_A \varepsilon^2 [ae^{-b\varepsilon} + ce^d e^{-f\varepsilon}] / [n_i^f + n^*] \ln \Lambda\}}. \quad (11)$$

Как уже отмечалось, внутреннее движение электронов из КС и СК в отличие от А и ВА инфинитно: электрон, меняя в зависимости от своего положения ближайшего соседа, т. е. переходя от одного кусочка эллипса или гиперболы на другой, может давать вклад в электропроводность. Так как смена ближайшего соседа происходит случайно, то, пренебрегая корреляцией между импульсами электрона на различных участках траектории, для величины столкновительного переноса $\Delta\sigma$, получим

$$\Delta\sigma = (e^2/m) (n_{КС} + n_{СК}) \tau.$$

Здесь τ — среднее время жизни комплекса. Для оценки воспользуемся временем жизни комплекса с нулевой энергией τ_0 , вычисленным в [16]: $\tau_0 = \beta e^2 / v_T \gamma^{3/2}$; $\gamma = \beta e^2 z_e^{1/2}$. Подставляя τ_0 в $\Delta\sigma$, получим

$$\Delta\sigma = (21/T^{3/2}) (\alpha^{3/2} + 0,73\alpha^{1/2}). \quad (12)$$

Полная величина электропроводности $\sigma = \sigma^f + \Delta\sigma$.

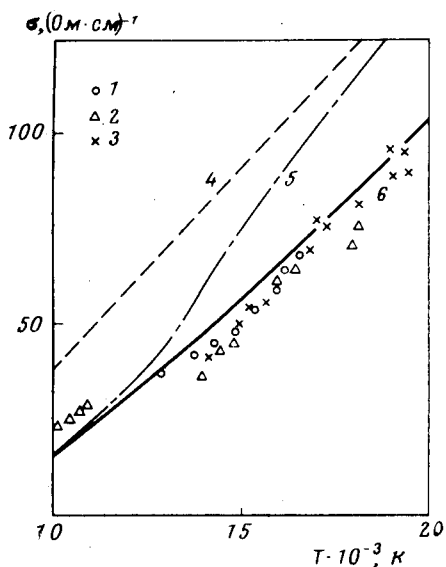


Рис. 2. Электропроводность плазмы аргона. Эксперимент: 1 — [6]; 2 — [8, 9]; 3 — [10]. Теория: 4 — спитцеровское значение; 5 — учет столкновений с атомами; 6 — расчет по (9)

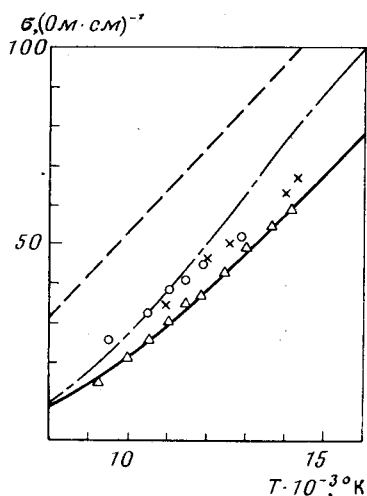


Рис. 3. Электропроводность плазмы ксенона. (Обозначения см. на рис. 2)

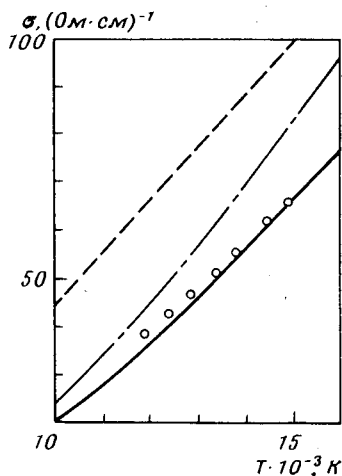


Рис. 4. Электропроводность плазмы криптона. (Обозначения см. на рис. 2)

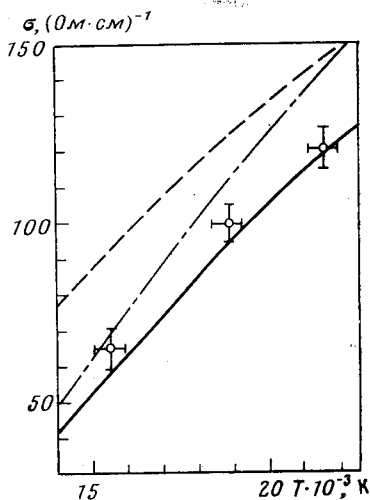


Рис. 5. Электропроводность плазмы водорода. Эксперимент [15]

Формулы (3) и (4) позволяют легко рассчитать уравнение состояния, (6), (7) и (8) — равновесный состав; (10) и (11) — электропроводность плазмы инертных газов.

Примеры расчета термодинамических функций, состава, электропроводности. Сравнение с экспериментом. В работе рассчитаны уравнение состояния, равновесные составы и электропроводность плазмы инертных газов Ar, Xe, Kr и водорода при $P=15$ атм в диапазоне 10 000—20 000 К. Результаты представлены в табл. 2. Концентрации приведены в единицах 10^{18} см $^{-3}$; T — в К; электропроводность — в $(\text{Om}\cdot\text{cm})^{-1}$.

Таблица 2

Атом	T, К	α	n	n_A	$n_i^f + n^*$	n_e^f	σ_S	γ	σ
Ar	10 000	0,08	10,9	10,8	0,06	0,054	38,8	0,41	14,3
	14 000	0,18	6,97	6,13	0,84	0,7	80,4	0,72	48,2
	18 000	0,2	3,9	1,63	2,27	1,85	122	0,9	89,9
Xe	10 000	0,22	1,04	1	0,45	0,36	51,6	0,51	21,3
	14 000	0,3	5,48	3	2,5	1,89	96,2	0,8	58,3
	18 000	0,23	3,29	0,34	2,95	2,36	127	0,95	96,8
Kr	10 000	0,13	10,6	10,5	0,16	0,14	44,1	0,53	20,3
	14 000	0,24	6,36	4,85	1,51	1,2	88,3	0,79	55,3
	18 000	0,22	3,51	0,8	2,71	2,18	125	0,94	94,6
H	14 000	0,16	7,17	6,55	0,62	0,53	76,9	0,63	40,9
	18 000	0,18	4,42	2,71	1,71	1,43	116	0,87	84,9
	22 000	0,15	2,86	0,68	2,18	1,86	149	0,96	123

Расчитанные значения электропроводности сравнивались с экспериментами [1, 4, 5, 8, 9]. Результаты сравнения представлены на рис. 2–5. Пунктир соответствует спитцеровскому значению электропроводности, штрихпунктир — учет столкновений лишь с сильносвязанными атомами n_A [8, 19], сплошная линия — расчет по формуле (9).

Проведенное сравнение показывает, что в области низких температур доминирующими являются столкновения электронов с атомами. Эти столкновения, как указывалось в [8, 19], и определяют отклонение от спитцеровского значения. С ростом температуры роль этих столкновений падает (растет степень ионизации). На первый план выходят столкновения с КС и СК. Учет этих столкновений устраняет имевшееся расхождение с экспериментом и дает удовлетворительное количественное описание в широком интервале температур. Вклад столкновительного переноса $\Delta\sigma$ оказывается несущественным в данных условиях. Однако с ростом неидеальности роль его увеличивается [16].

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
19 X 1976

ЛИТЕРАТУРА

1. Б. Н. Ломакин, В. Е. Фортов. ЖЭТФ, 63, 92, 1972.
2. В. Е. Беспалов, В. К. Грязнов, А. Н. Дремин, В. Е. Фортов. ЖЭТФ, 69, 2054, 1975.
3. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин. ТВТ, 14, 204, 1976.
4. А. А. Веденов, А. И. Ларкин. ЖЭТФ, 36, 1133, 1959; А. И. Ларкин. ЖЭТФ, 36, 1896, 1960.
5. G. Bartsh, W. Ebeling. Beitr. Plasmaphys., 11, 393, 1971.
6. А. А. Бакеев, Р. Е. Ровинский. ТВТ, 8, 207, 1121, 1970.
7. В. М. Батенин, П. В. Минаев. ТВТ, 9, 676, 1971.
8. С. М. Вукович, М. М. Попович. ТВТ, 10, 419, 1972.
9. М. М. Поповић, S. S. Поповић, S. M. Vucoviћ. Fizika, 6, 29, 1974.
10. R. Radtke, K. Günter. Beitr. Plasmaphys., 15, 299, 1975.
11. Н. В. Ермохин, Б. М. Ковалев, П. П. Кулик, В. А. Рябый. ТВТ, 9, 665, 1971.
12. Л. П. Огурцова, И. В. Подмошенский, В. Л. Смирнов. ТВТ, 12, 650, 1974.
13. С. В. Алипов, П. В. Ткаченко. ТВТ, 12, 1299, 1974.
14. С. И. Андреев, Г. В. Газрилова. ТВТ, 13, 176, 1975.
15. K. Günter, M. M. Popoviћ, S. S. Popoviћ, R. Radtke. J. Phys., D, 9, 1131, 1976.
16. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин. ТВТ, 15, 488, 1977.
17. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин. Физика плазмы, 3, 894, 1977.
18. В. А. Бржезицкий. ТВТ, 10, 7, 1972.
19. А. Л. Хомкин. ТВТ, 12, 879, 1974.