ческие функции NiAs, которые могут быть использованы при анализе реакций, протекающих в процессе переработки мышьяксодержащего сырья.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Платунов Е.С., Бурова С.Е. и др.* Теплофизические измерения и приборы. Л.: Машиностроение, 1986. 256 с.
2. *Чунаева В.Д., Мулдагалиева Р.А., Исабаев С.М., Полукаров А.Н.* Термическая устойчивость и кинетика разложения сульфоарсенида никеля // Комплексное исследование минерального сырья. 1990. № 1. С. 77.
3. *Кумок В.Н.* Проблемы согласования методов оценки термодинамических характеристик // Прямые и обратные задачи химической термодинамики. Новосибирск: Наука, 1987. С. 108.

УДК 533.9.01

К ТЕРМОДИНАМИКЕ СЛАБОНЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ

© 1995 г. Ф. Б. Баимбетов, К. Н. Джумагулова, Т. С. Рамазанов

НИИ экспериментальной и теоретической физики Казахского ГНУ, г. Алма-Ата

Поступило в редакцию 28.07.94 г.

Одним из надежных методов для вычисления термодинамических характеристик плазмы является метод Монте-Карло. Однако для слабонеидеальных систем, ввиду плохой сходимости цепи Маркова, погрешности, накопленные в ходе моделирования, могут серьезным образом отразиться на результатах расчетов [1, 2]. Поэтому для исследования термодинамики слабонеидеальной плазмы применяется метод интегральных уравнений, связывающий парные корреляционные функции с потенциалом взаимодействия частиц системы. Одним из таких уравнений является уравнение Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ) для парной радиальной функции распределения $g^{\alpha\beta}(r)$

$$-\Theta\nabla_i \ln g({}^q\mathbf{r}_i, {}^m\mathbf{r}_l) = \nabla_i\Phi({}^q\mathbf{r}_i, {}^m\mathbf{r}_l) + \sum_k n_k \int (\nabla_i\Phi_{ij})\, g({}^q\mathbf{r}_i, {}^k\mathbf{r}_j) g({}^m\mathbf{r}_l, {}^k\mathbf{r}_j)\, d\,{}^k\mathbf{r}_j, \quad (1)$$

где q, m, k – сорта частиц. В качестве парного потенциала взаимодействия в данной работе взят псевдопотенциал, вычисленный на основе цепочки Боголюбова и учитывающий одновременную корреляцию N частиц [3]. В приближении трехчастичных корреляций он записывается в виде

$$\Psi(R) = \gamma\left[1 + \frac{\gamma}{2}\{(Ei(-R_0) - Ei(-R)) - (Ei(-3R_0)e^{2R_0} - Ei(-3R)e^{2R})\}\right]e^{-R}/R. \quad (2)$$

Здесь $Ei(-ax)\int_x^\infty \exp(-at)/t\,dt$ – интегральная показательная функция; $\gamma = Z_1Z_2e^2/(r_Д k_Б T)$ – параметр неидеальности; Ψ – потенциал в единицах $k_Б T$; $r_Д$ – радиус Дебая; $R = r/r_Д$; R_0 – минимальное расстояние сближения частиц в единицах $r_Д$. Необходимо подбирать R_0 таким, чтобы оно было больше $a_Б^*$ (радиус Бора в единицах $r_Д$), поскольку рассматривается только классическая система частиц. К примеру, для $\gamma \le 0.8$ это условие выполняется при $R_0 = 0.05$.

Отметим, что эффективный потенциал (2) учитывает экранировку поля зарядов в плазме, обусловленную плотностными эффектами. При $\gamma \ll 1$ выражение, стоящее в фигурных скобках в (2), является малым более высокого порядка и тогда из (2) получим $\Psi(R) = \gamma e^{-R/R}$ – потенциал Дебая–Хюккеля, учитывающий поляризационные эффекты в приближении парных корреляций. Далее при $R \ll 1$ имеем $\Psi(R) = \gamma/R$ – обычный потенциал Кулона, означающий отсутствие эффектов экранирования.

Уравнение (1) получено в суперпозиционном приближении Кирквуда, когда парные корреляции остаются независимыми от присутствия третьей частицы. Но в расчетах, приведенных в предлагаемой работе, применение данного приближения можно считать оправданным, поскольку влияние третьей частицы на взаимодействие пар учитывается в потенциале взаимодействия (2).

Радиальные функции распределения и уравнение состояния плазмы. Для численного решения уравнения ББГКИ удобно перейти к биполярным координатам [4]. Тогда уравнение (1) будет иметь вид

$$\ln g^{-+}(\mathcal{R}_1) = -\Psi^{-+}(\mathcal{R}_1) + \frac{\pi n_+}{\mathcal{R}_1}\int_0^\infty [K^{-+}(R_1 - r) - K^{-+}(R_1 + r)]\, r\,[g^{++}(r) - 1]\, dr + \frac{\pi n_-}{R_1}\int_0^\infty [K^{--}(R_1 - r) - K^{--}(R_1 + r)]\, r\,[g^{+-}(r) - 1]\, dr; \quad (3)$$

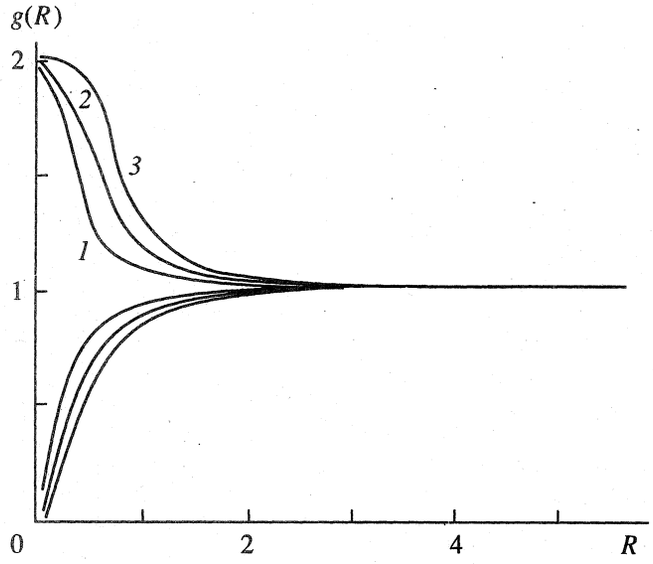

Рис. 1. Радиальные функции распределения плазмы водорода при различных значениях параметра неидеальности: *1* – $\gamma = 0.2$, *2* – $\gamma = 0.4$, *3* – $\gamma = 0.6$. Кривые выше единицы – функции распределения для разноименных зарядов, ниже – для одноименных.

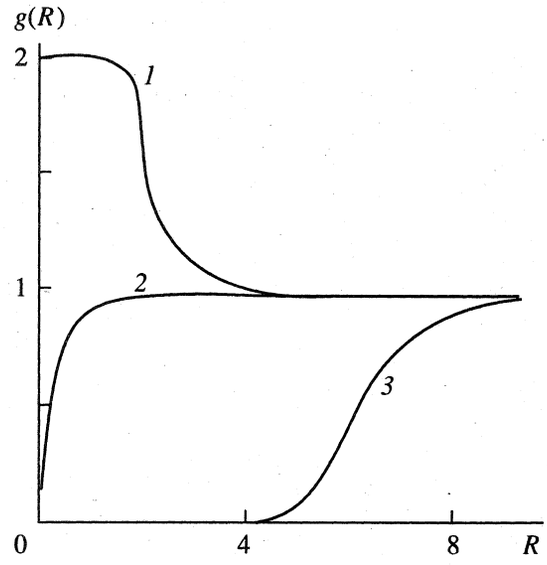

Рис. 2. Радиальные функции распределения для полностью ионизованной плазмы аргона ($Z_i = 18$): *1* – $g^{+-}(R)$, *2* – $g^{--}(R)$, *3* – $g^{++}(R)$.

$$K^{\alpha\beta}(t) = (s^2 - t^2)\frac{d\Psi^{\alpha\beta}(s)}{ds}. \qquad (4)$$

Здесь α, β – "плюс", "минус" сорта частиц. Так как в ионизованной плазме имеется по крайней мере два сорта заряженных частиц, то получаем четыре замкнутых уравнения для $g^{++}(R)$, $g^{+-}(R)$, $g^{--}(R)$, $g^{-+}(R)$. Уравнение (3) решается методом итераций, в качестве нулевого приближения принимается следующая функция:

$$g_0^{\alpha\beta}(R) = \exp(-\Psi^{\alpha\beta}(R)). \qquad (5)$$

Отметим, что выбор начального приближения $g_0^{\alpha\beta}(R)$ в виде (5) необязателен, так как вид начального приближения практически не влияет на конечные результаты, хотя в некоторых случаях ухудшается сходимость итерационного процесса и увеличивается компьютерное время.

Изложенный выше метод можно применять для вычисления радиальных функций как однократно, так и многократно ионизованной плазмы. На рис. 1 и 2 представлены радиальные функции полностью ионизованных плазмы водорода ($n_e = n_i$) и аргона ($n_e = 18n_i$). Расчет радиальных функций для различных γ можно провести вплоть до $\gamma = 0.8$. Отметим, что диапазон $\gamma = (0.01 - 0.8)$ является некоторой границей применимости излагаемого в работе метода. В целях проверки достоверности вычисленных радиальных функций распределения необходимо проверить выполнение следующего соотношения [5]:

$$n_\alpha \int [g^{\alpha\beta}(r) - g^{\alpha\alpha}(r)]\, dV = 1. \qquad (6)$$

Корреляционные функции, полученные в данной работе, удовлетворяют условию (6) с погрешностью <10%. Отметим также, что полученные радиальные функции распределения в целом качественно согласуются с результатами из [6].

На основе полученных радиальных функций распределения можно оценить вклад взаимодействия в уравнения состояния плазмы

$$\frac{P_0}{nk_Б T} = 1 - \frac{4\pi n}{6}\int_0^\infty \sum_{\alpha,\beta} g^{\alpha\beta}(r)\frac{\partial\Psi^{\alpha\beta}(r)}{\partial r} r^3 dr, \qquad (7)$$

$$\frac{E_0}{Nk_Б T} = \frac{4\pi n}{2}\int_0^\infty \sum_{\alpha,\beta} g^{\alpha\beta}(r)\Psi^{\alpha\beta}(r) r^2 dr = E^*, \qquad (8)$$

где P_0 – давление; E_0 – энергия взаимодействия подсистемы ионов и электронов. Из уравнений (7) и (8) следует, что термодинамические величины (приведенные) зависят только от одного параметра γ, что позволяет установить подобие термодинамических величин для различных температур.

С помощью уравнения (7) вычисляется вклад, вносимый свободными электронами и ионами. Необходимо также учесть вклад атомов. Концентрацию атомов можно найти из уравнения ионизационного равновесия [7]. Атомная компонента принимается идеальной, т.е. полное давление системы имеет вид

$$P = P_0 + n_\alpha k_Б T. \qquad (9)$$

Полученные результаты по вкладу во внутреннюю энергию представлены на рис. 3.

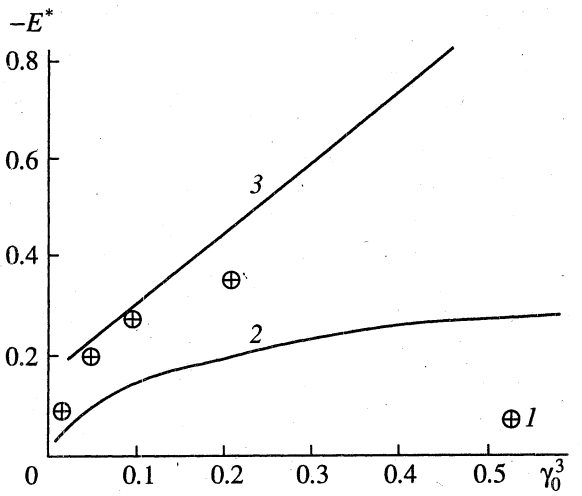

Рис. 3. Приведенная энергия взаимодействия заряженных частиц неидеальной плазмы: *1* – результаты [8], полученные для $\varepsilon = 2$; *2* – данная работа; *3* – предельный закон Дебая–Хюккеля.

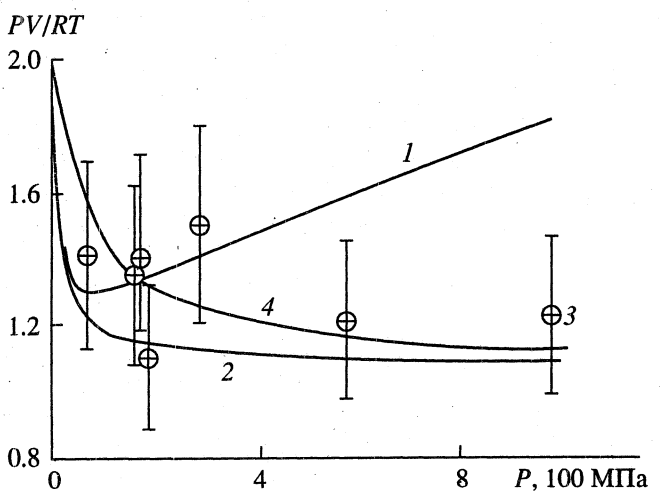

Рис. 4. Термическое уравнение состояния плазмы аргона: *1* – расчетная изотерма, полученная на основе модели "ограниченного" атома [2]; *2* – расчетная изотерма, полученная на основе псевдопотенциальной модели, предложенной в [2]; *3* – экспериментальные данные [9, 10]; *4* – изотерма, полученная в данной работе.

Для удобства сравнения с данными, полученными в [8], приведенная энергия взаимодействия дана в зависимости от параметра $\gamma_0^3 = (4\pi)^{-1}\gamma^2$, где $\gamma_0 = [Z_1 Z_2 e^2/(k_Б T)]n^{1/3}$ – отношение потенциальной энергии взаимодействия частиц, находящихся на расстояниях $\sim n^{-1/3}$, к их кинетической энергии. В некоторых случаях удобно пользоваться γ_0^3, так как для конкретно выбранной изотермы $\gamma_0^3 = \mathrm{const}\,n$, т.е. параметр γ_0^3 растет линейно с ростом плотности частиц. Из рис. 3 видно, что в результатах, полученных в предлагаемой работе, неидеальность выражена слабее, чем в аналогичных данных из [8]. Это, возможно, объясняется повышением роли кулоновского отталкивания в нашей модели, которое обусловлено видом псевдопотенциала (2).

Для сравнения с экспериментальными данными авторы рассчитали термическое уравнение состояния аргоновой плазмы при температуре $T = 20000$ K. При этом γ изменялось от 0.05 до 0.5 включительно. Расчет химического состава плазмы достаточно сложен, но в равновесном состоянии при $T = 20000$ K объемные доли атомов аргона и его двухкратно ионизованных ионов имеют значения меньше 0.1 [7], следовательно, в первом приближении плазму можно считать полностью однократно ионизованной. Термическое уравнение состояния приведено на рис. 4, из которого видно, что полученная изотерма вполне согласуется с экспериментальными данными [9, 10], а также с кривыми, полученными на основе других моделей [2].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Баимбетов Ф.Б., Рамазанов Т.С., Шалтыков Н.Б.* Равновесные свойства плотной классической плазмы. Данные вычисленных экспериментов // ТВТ. 1990. Т. 28. № 3. С. 595.
2. Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора / Под ред. Иевлева В.М. М.: Атомиздат, 1980.
3. *Баимбетов Ф.Б., Рамазанов Т.С., Шалтыков Н.Б.* Уравнение для псевдопотенциала плотной плазмы. Проблемы статистической механики. Дубна: Объединенный ин-т ядерных исследований, 1984. С. 28.
4. *Баимбетов Ф.Б., Нурекенов Х.Т., Рамазанов Т.С.* К электропроводности слабонеидеальной плазмы // Физика плазмы. 1992. Т. 18. С. 1627.
5. *Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С.* Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977.
6. *Barker A.A.* Radial Distribution Functions for a Hydrogenous Plasma in Equilibrium // Phys. Rev. 1969. V. 179. № 2. P. 129.
7. Очерки по химии и физике низкотемпературной плазмы / Под ред. Полака Л.С. М.: Наука, 1971.
8. *Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов Б.С.* К статистической теории неидеальной плазмы // ТВТ. 1972. Т. 10. № 6. С. 1160.
9. *Беспалов В.Е., Грязнов В.К., Дремин А.Н., Фортов В.Е.* Динамическое сжатие неидеальной плазмы аргона // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. С. 2059.
10. *Фортов В.Е., Леонтьев А.А. и др.* Генерация неидеальной плазмы мощными ударными волнами // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. С. 225.