

部分电离稠密氦等离子体物态方程的自洽变分计算*

张 颖^{1)†} 陈其峰^{1)†} 顾云军¹⁾ 蔡灵仓¹⁾ 卢铁城²⁾

1) 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰波物理实验室, 绵阳 621900)

2) 四川大学物理系, 辐射物理及技术教育部重点实验室, 成都 610064)

(2006 年 3 月 21 日收到, 2006 年 4 月 13 日收到修改稿)

稠密氦在高温高压下将会发生电离, 电离能会因为原子、离子以及电子之间的相互作用而降低. 考虑 He, He⁺, He²⁺, e 之间的相互作用, 通过粒子化学势平衡得到非理想的电离平衡方程, 用自洽流体变分过程对方程求解, 进而对自由能求导获得体系的热力学状态参量. 模型计算结果与已有的实验和理论计算相一致. 用此模型预测密度 10⁻³—10^{0.3} g/cm³ 和温度 4—7 eV 范围的物态方程, 获得了压力在 500 GPa 以内的理论数据. 计算表明粒子间的非理想相互作用引起的电离能降低是出现压致电离现象的主要原因, 在高温高密度物态方程的计算中必须考虑粒子间非理想相互作用对电离能修正的影响.

关键词: 氦, 物态方程, 部分电离等离子体, 自洽变分

PACC: 0570C, 6400, 6500

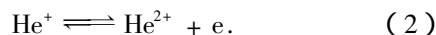
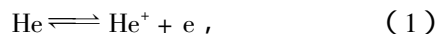
1. 引 言

氦是宇宙中丰度最高的元素之一, 它在高温高压下的性质对研究星体演化、木星类行星^[1] (木星、土星、天王星) 的结构特性具有重要意义. 众所周知, 氦原子电子结构简单, 只有 1s 闭壳层, 用基本的量子力学原理就能较精确地描述它的性质, 但在极端条件下, 它的凝聚态性质一直是理论和实验工作者关注的前沿课题之一^[2-14]. 静高压技术的发展, 使高密度氦晶体物态方程的研究取得了较大进展, 测得了高压下固态氦的结构、相图和物态方程^[2-5]. 而气炮和激光驱动加载技术的发展, 把氦的研究扩展到了高温、高压的领域. Nellis 等人用气炮对液态氦进行冲击压缩实验研究, 使二次冲击压强达到了 56 GPa^[6], 我们也对稠密氦气的冲击压缩特性进行了研究^[7,8]. 近年来, 从自由能模型和第一性原理发展出了一系列计算流体物态方程的方法, 如液体微扰变分理论^[6,9]、路径蒙卡方法^[10]、分子动力学方法^[11]等, 这些方法依赖于分子间有效相互作用势. 对部分电离等离子体, 还要考虑由离子和电子引起的相互作用^[12-15], 并且这些相互作用会导致电离能的降低. 文献 [12] 对粒子间的相互作

用考虑的并不全面, 文献 [13] 在带电粒子间采用德拜-休克尔 (Debye-Hückel) 势, 只适合于密度较低的情况, 文献 [14, 15] 对粒子间相互作用考虑的比较充分, 但并未给出这些相互作用对电离能的影响. 本文通过考虑各种粒子间的相互作用和在电离化学平衡的基础上, 用自洽变分方法求解带电电离能修正的电离平衡方程, 再由自由能计算出部分电离氦等离子体的热力学状态参量, 结果与已有的实验和理论进行了比较, 并预测了较宽密度和温度范围内的物态方程.

2. 自洽变分自由能模型

在压强和温度足够高的情况下, 氦将发生一次和二次电离, 即体系中主要存在以下电离化学反应:



这时体系中含有的粒子为 He, He⁺, He²⁺, e, 体积 V 内的粒子数分别记为 N_0, n_1, n_2, n_e . 系统的赫姆霍兹 (Helmholtz) 自由能为

$$F(N_0, n_1, n_2, n_e, V, T) = F^{\text{id}} + F^{\text{conf}} + F^{\text{coul}} + F^{\text{pol}}. \quad (3)$$

*国家自然科学基金(批准号:10674120)和中国工程物理研究院冲击波物理和爆轰波物理国家重点实验室基金(批准号:9140C67120206ZS7502)资助的课题.

† E-mail: Chen_qifeng@iapcm.ac.cn

其中, F^{id} 为粒子理想自由能, F^{conf} , F^{coul} , F^{pol} 分别为粒子的位形作用、库仑作用、极化作用自由能.

2.1. 理想自由能

粒子的理想自由能, 包括原子和各级离子的平动自由能, 原子和各级离子的内部电子自由能及自由电子气体的自由能. 原子和离子的平动服从玻尔兹曼(Boltzmann)分布, 把自由电子作为部分简并的费米(Fermi)气体, 这样理想自由能可写为

$$F^{\text{id}} = k_B T \sum_{i=0}^2 N_i \{ \ln(n_i \Lambda_i^3 / Z^{\text{int}}) \} - 1 \} + N_e k_B T [\xi - \frac{2}{3} I_{3/2}(\xi) I_{1/2}(\xi)], \quad (4)$$

式中, k_B 是 Boltzmann 常数, T 是体系温度, n_i 为粒子 i 的粒子数密度, Λ_i 为粒子的热德布罗意(de Broglie)波长, $\Lambda_i = (2\pi\hbar^2/m_i k_B T)^{1/2}$, $I_n(\xi)$ 是费米-狄拉克(Fermi-Dirac)积分

$$I_n(\xi) = \int_0^\infty \frac{x^n dx}{e^{x-\xi} + 1}, \quad \xi = \mu_e^{\text{id}}/k_B T, \quad (5)$$

μ_e^{id} 为电子的理想化学势, ξ 可通过(5)由方程(6)解出

$$I_{1/2}(\xi) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{N_e \Lambda_e^3}{V}. \quad (6)$$

Z_i^{int} 表示粒子 i 的内部电子配分函数, 即

$$Z_i^{\text{int}} = U_i \exp(-\epsilon_{i0}/k_B T), \\ U_i = \sum_{\alpha} g_{i\alpha} \exp(-W_{i\alpha}/k_B T), \quad (7)$$

ϵ_{i0} 是第 i 级离子的基态能量, $g_{i\alpha}$ 和 $W_{i\alpha}$ 分别表示第 i 级离子在激发态 α 时的简并度和激发能, 它们的值取自文献[16]. 在计算过程中, 认为氦原子和氦离子内部电子的配分函数只是温度的函数, 忽略高温高密度下离子基态能量和内部电子激发态能级的改变.

2.2. 位形相互作用自由能

原子和分子间的弱相互作用可分为参考势和微扰势, 若以硬球势为参考势, F^{conf} 分为三部分, 即硬球混合超额自由能, 微扰自由能及量子力学修正自由能

$$F^{\text{conf}} = F^{\text{hs}} + F^{\text{pert}} + F^{\text{qm}}. \quad (8)$$

He^{2+} 是裸核粒子, 其直径可以忽略, $d_2 \approx 0$, 仅考虑由 He 和 He^+ 组成的二元硬球混合, 其自由能为^[17]

$$\frac{F^{\text{hs}}}{(N_0 + N_1)k_B T} = -\frac{3}{2}(1 - y_1 + y_2 + y_3) + \frac{3y_2 + 2y_3}{1 - \eta}$$

$$+ \frac{3}{2} \frac{1 - y_1 - y_2 - \frac{1}{3}y_3}{(1 - \eta)^2} + (y_3 - 1) \ln(1 - \eta), \quad (9)$$

式中

$$\eta = \sum_{i=1}^m \eta_i, \quad \eta_i = \frac{1}{6} \pi \rho_N d_i^3 x_i, \quad \sum_{i=0}^m x_i = 1,$$

$$y_1 = \sum_{j>i=0}^m \Delta_{ij} (d_i + d_j) \chi(d_i d_j)^{1/2},$$

$$y_2 = \sum_{j>i=0}^m \Delta_{ij} \sum_{k=0}^m \left(\frac{\eta_k}{\eta} \right) \frac{(d_i d_j)^2}{d_k},$$

$$y_3 = \left[\sum_{i=0}^m \left(\frac{\eta_i}{\eta} \right)^{2/3} x_i^{1/3} \right]^3,$$

$$\Delta_{ij} = [(\eta_i \eta_j)^{1/2} / \eta] \mathbf{I}(d_i - d_j) \mathbf{I}(d_i d_j) \mathbf{I}(x_i x_j)^{1/2},$$

其中 ρ_N 为粒子数密度, x_i , d_i 分别为粒子 i 的摩尔百分比和硬球直径, 把 He^+ 作为类氢原子处理, 硬球直径 $d_1 \approx 3a_B/Z^{14}$, a_B 为波尔(Bohr)半径.

氦离子间的微扰作用比其库仑作用较弱, 忽略它们之间的微扰作用, 只考虑氦原子间的微扰自由能, 由下式给出^[18]:

$$F^{\text{pert}} = \frac{2\pi N_0^2}{V} \int_{d_0}^\infty g_{\text{hs}}(r, \eta_0) \Phi(r) r^2 dr, \quad (10)$$

这里 $\eta_0 = \frac{\pi}{6} \frac{N_0}{V} d_0^3$, d_0 为氦原子硬球直径, $g_{\text{hs}}(r, \eta)$ 为硬球径向分布函数, $\Phi(r)$ 为氦原子间的相互作用势. 当氦原子间的距离在 0.5—1.8Å 之间时, Ceperley 和 Partridge 提出的势(CP 势)^[19]与从头算结果相一致. 距离大于 1.8Å 时, Aziz 势^[20]与 CP 势衔接得较好. 考虑高密度下多体作用的影响, Winsidoerffer 和 Chabrier 将势修正为^[15]

$$\Phi(r) = \left((1 - C) + \frac{C}{1 + D\rho} \right) \phi(r), \\ \phi(r) = \begin{cases} \phi^{\text{CP}} & (0.5 \leq r(\text{\AA}) \leq 1.8), \\ \phi^{\text{Aziz}} & (r(\text{\AA}) > 1.8), \end{cases} \quad (11)$$

其中 ρ 为体系密度, C, D 即为考虑多体作用而引入的修正参数, $(C, D) = (0.44, 0.8 \text{ cm}^3/\text{g})$ 时, 用修正势计算出的绝势声速与实验测量值符合得较好. 文中即选用此修正势.

低温高密度下, 原子的热 de Broglie 波长与原子间的距离可以比拟, 氦原子之间的相互作用还应考虑量子力学修正^[21]

$$F^{\text{qm}} = \frac{\hbar^2 N_0^2}{24m_{\text{He}} V k_B T} \int_{d_0}^\infty \nabla^2 \Phi(r) g_{\text{hs}}(r, \eta) \chi^3 r. \quad (12)$$

氦原子硬球直径 d_0 取使 F^{conf} 最小的值, 并以此最

小值作为 F^{conf} 的值^[13,18].

2.3. 带电粒子间的库仑作用对自由能的贡献

带电粒子间的库仑作用可以分为四部分

$$F^{\text{coul}} = F_{ee}^x + F_{ee}^c + F_{ii}^x + F_{ie}^x. \quad (13)$$

其中 F_{ee}^x 为电子与电子间的交换作用, 用哈特里-福

克(Hartree-Fock)积分计算^[22]

$$\frac{F_{ee}^x}{N_e k_B T} = \frac{e^2}{\pi \Lambda_e^4} \frac{V}{N_e k_B T} J_{\text{rel}}^x. \quad (14)$$

J_{rel}^x 为相对论的 Hartree-Fock 积分. $F_{ee}^c, F_{ii}^c, F_{ie}^c$ 分别电子与电子、离子与离子、离子与电子间的库仑相互作用, 采用 Padé 近似计算^[22]

$$\frac{F_{ee}^c}{N_e k_B T} = - \frac{a_0 \Gamma_e^{3/2} - a_2 \Gamma_e^{6\Gamma} [\epsilon_c(r_s, 0) + \Delta \epsilon_c(r_s, \tau)] \Upsilon \tau}{1 + a_1 a_3 \Gamma_e^{3/2} + a_2 \Gamma_e^6}; \quad (15)$$

$$\frac{F_{ii}^c}{N_{\text{ion}} k_B T} = - \frac{b_0 \Gamma_{\text{ion}}^{3/2} [1 + b_3 \Gamma_{\text{ion}}^{3/2} F(\Gamma_{\text{ion}})] + b_2 \Gamma_{\text{ion}}^6 \epsilon_{ii}(\Gamma_{\text{ion}})}{1 - b_1 \Gamma_{\text{ion}}^3 \alpha(\Gamma_{\text{ion}}) + b_2 \Gamma_{\text{ion}}^6}; \quad (16)$$

$$\frac{F_{ie}^c}{N_{\text{ion}} k_B T} = - \frac{c_0 \Gamma_{\text{ion}}^{3/2} + c_2 \Gamma_e^{9/2} \epsilon_{ie}}{1 + c_1 \Gamma_{\text{ion}}^{3/2} + c_2 \Gamma_e^{9/2} + 2c_4 \Gamma_{\text{ion}}^{3/2} \ln[1 + (c_5/\Gamma_{\text{ion}}^3)^{1/2}]}. \quad (17)$$

其中 N_{ion} 为粒子总数; τ 是无量纲温度, $\tau = k_B T / \text{Ryd}$, $1 \text{Ryd} = 13.60580 \text{ eV}$; $r_s = \frac{m_e e^2}{\hbar^2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/3} \frac{1}{n_e^{1/3}}$, 为电子间的平均距离; $\epsilon_c(r_s, 0)$ 为电子基态能量; $\Delta \epsilon_c(r_s, \tau)$ 为低温修正能; ϵ_{ii} 为强耦合限制自由能; ϵ_{ie} 为电子间的强耦合自由能; Γ 是非理想耦合参数

$$\Gamma_{\text{ion}} = Z^{1/3} Z^{5/3} \frac{e^2}{k_B T} \left(\frac{4\pi}{3} \sum_i n_i \right)^{1/3},$$

$$\Gamma_e = \frac{e^2}{k_B T} \left(\frac{4\pi}{3} n_e \right)^{1/3}, \quad (18)$$

其中平均电荷

$$Z^v = \sum_i n_i Z_i^v / \sum_i n_i. \quad (19)$$

Z_i 为对应离子的电荷数.

2.4. 带电粒子与中性粒子间的极化作用对自由能的贡献

带电粒子会引起中性粒子的极化, 极化作用对自由能的贡献为^[23,24]

$$F^{\text{pol}} = \frac{2k_B T}{V} N_0 \sum_i (N_i B_{0,i}), \quad (i = 1, 2, e), \quad (20)$$

其中 $B_{0,i}$ 为第二维里系数

$$B_{0,i} = 2\pi \int_{\sigma_{\text{He}-i}}^{\infty} r^2 (1 - e^{-\phi_i^{\text{pol}}/k_B T}) dr, \quad (21)$$

ϕ_i^{pol} 为带电粒子 i 与氢原子间的极化势

$$\phi_i^{\text{pol}} = - \frac{Z_i e^2 \alpha_i}{8\pi \epsilon_0} \left(\frac{1 + \kappa r}{r^2 + \sigma_{\text{He}-i}^2} \right)^2 e^{-2\kappa r}, \quad (22)$$

其中 $\sigma_{\text{He}-i}$ 为硬核半径, $\sigma_{\text{He}-e} = \sigma_{\text{He}-\text{He}^{2+}} = d_0, \sigma_{\text{He}-\text{He}^+}$

$= (d_0 + d_1) \mathcal{L}^{[15,25]}$; α_i 为偶极极化率, 视带电粒子为点电荷(忽略带电粒子尺寸的影响), $\alpha_i \approx 1.383 \alpha_B^3$ ^[26]; κ 是等离子体屏蔽长度的倒数^[23], 即

$$\kappa^2 = \frac{3\pi e^2}{k_B T} \frac{N_e}{V} \Theta^{3/2} I_{-1/2}(\mu_e^{\text{id}}/k_B T), \Theta = \frac{k_B T}{E_F}, \quad (23)$$

E_F 为 Fermi 能, $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e} (3\pi^2 n_e)^{2/3}$.

2.5. 电离平衡

体系达到电离平衡时, 粒子的化学势满足下式

$$\mu_{i-1} = \mu_i + \mu_e, \quad (i = 1, 2). \quad (24)$$

化学势可分为理想部分和相关部分, 因此上式可改写为

$$\mu_{i-1}^{\text{id}} + \mu_{i-1}^c = (\mu_i^{\text{id}} + \mu_i^c) + (\mu_e^{\text{id}} + \mu_e^c). \quad (25)$$

其中

$$\mu_i^{\text{id}} = \frac{\partial F^{\text{id}}}{\partial N_i}, \mu_e^{\text{id}} = k_B T \xi, \mu_i^c = \frac{\partial F^c}{\partial N_i}, \quad (26)$$

$$F^c = F^{\text{conf}} + F^{\text{coul}} + F^{\text{pol}}. \quad (27)$$

把(4)(8)(26)式代入(25)式, 可以得到电离平衡方程

$$N_i = K_i N_{i-1}, \quad (i = 1, 2). \quad (28)$$

其中电离平衡常数 $K_i = \frac{U_i}{U_{i-1}} \exp\left(-\frac{I'_i}{k_B T} - \xi\right)$, $I'_i = I_i - \Delta I_i$, I_i 是电离能, $\Delta I_i = \mu_{i-1}^c - \mu_i^c - \mu_e^c$, 为电离能修正. 方程(6)(28)含三个方程, 要求解五个未知变量 N_0, N_1, N_2, N_e 和 ξ , 还需两个守恒关系, 即质量守恒和电荷守恒

$$N_0 + N_1 + N_2 = N_A, \quad (29)$$

$$N_e = N_1 + 2N_2. \quad (30)$$

其中 N_A 为氢粒子的总数. 粒子数和修正电离能可由方程(6)(28)(29)和(30)联立自洽迭代求解.

2.6. 热力学参数

计算出粒子数后,可以求出自由能,进而运用热力学公式解出氢等离子体的压强 P 、内能 E 及熵 S ,

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T, \quad (31)$$

$$E = - T^2 \frac{\partial (F/T)}{\partial T}, \quad (32)$$

$$S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V. \quad (33)$$

雨贡纽(Hugoniot)曲线还必须满足兰金-雨贡纽(Rankine-Hugoniot)关系

$$E_H = E_0 + \frac{1}{2}(P_H + P_0)(V_0 - V_H). \quad (34)$$

E_0, P_0, V_0 分别为波阵前(初态)的比内能、压强、比容, E_H, P_H, V_H 分别为冲击压缩后对应的状态参数.

3. 结果与讨论

为检验模型的可靠性,图1给出了从初态($T = 4 \text{ K}$, $V = 32.4 \text{ cm}^3/\text{mol}$)冲击压缩理论计算 Hugoniot 曲线与 Nellis 等人实验值^[6]比较,可以看出,目前模型计算与实验较好符合. 图2也给出了理论计算的等温线与 Winsidoerffer 等人的计算值^[15]比较,可以看出,两者在温度 $10^{4.2} - 10^{4.5} \text{ K}$, 密度 $10^{-2} - 10^{0.4} \text{ g/cm}^3$ 的密度范围内有较好的符合程度. 说明目前模型在计算宽区域的部分氢等离子体热力学状态是可靠的.

图3给出了密度在 $10^{-3} - 10^{0.3} \text{ g/cm}^3$ 范围内粒子间的相互作用所引起的电离能修正随密度的变化. 从图中可以看出,温度、密度增大时,电离能修正也增大. 密度低于 0.2 g/cm^3 时,电离能修正增长较快,当密度趋于零时,修正也趋于零. 这是因为密度趋于零时,粒子间距变大,相互作用变弱,使电离能修正变得很小. 密度大于 0.4 g/cm^3 时,修正量基本呈线性增加. 在电离能修正中起主导作用的是库仑非理想相互作用,为此,将表征库仑相互作用强弱的非理想耦合参数随密度变化的关系在图4中给出. 可以看出,耦合参数与电离能修正的变化规律相似. 当密度小于 0.2 g/cm^3 时, $\Gamma_{\text{ion}}, \Gamma_e$ 增幅较大,

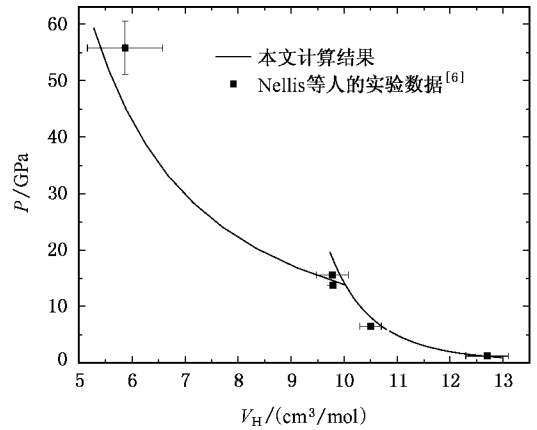


图1 液氢 Hugoniot 曲线

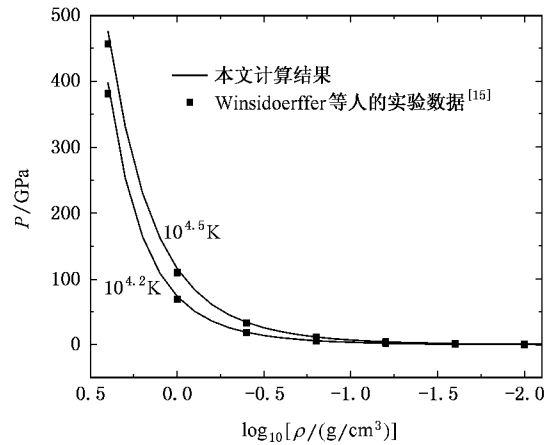


图2 氢等离子体的等温线

这是在此区间电离能修正也增长较快的原因. 同时,计算中还发现,当密度进一步增加时,自洽迭代收敛性逐渐变差,迭代计算十分耗时,使电离平衡方程变得难以求解. 因此对于更高密度(大于 2 g/cm^3)的计算,各种粒子间的强相互作用将变的更加复杂,计算模型需要进一步的修正,这将是今后需要解决的问题.

图5,6分别给出了电离度、压强在考虑电离能修正与不考虑电离能修正时随密度的变化. 从图5可以看出,不考虑电离能修正时,电离度随密度的增加单调递减,而考虑了修正的电离度随着密度的增加逐渐减小,达到一极小值后又随密度增加而增加,并且极小值出现的位置随温度的增加向着密度增大的方向移动. 从考虑电离能修正后电离度的变化可以看出,粒子间的非理想相互作用引起的电离能降低是导致压致电离的主要原因. 从图6中可

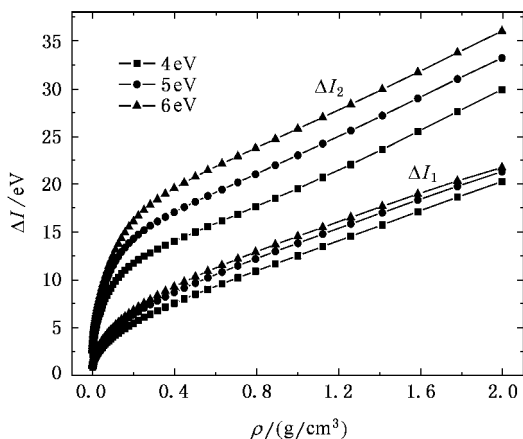


图 3 在不同温度下电离能修正随密度变化曲线

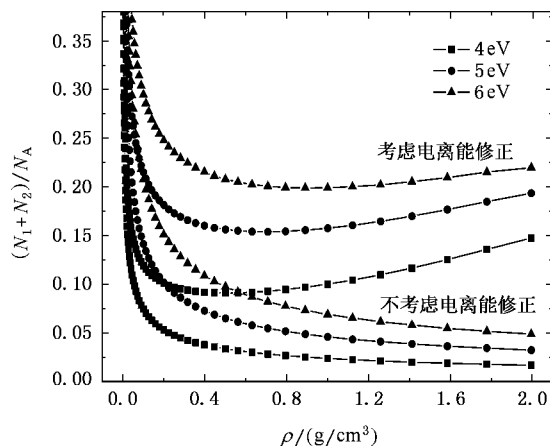


图 5 在不同温度下电离度随密度变化曲线

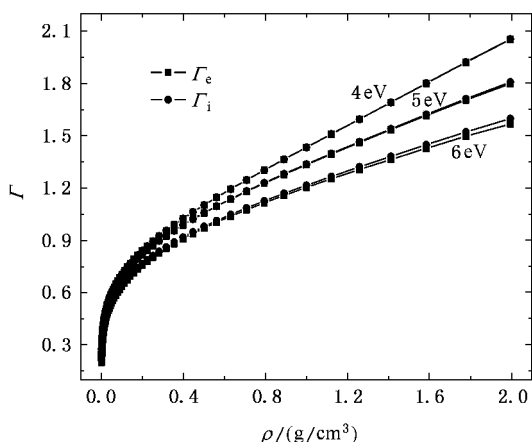


图 4 在不同温度下非理想耦合参数随密度变化曲线

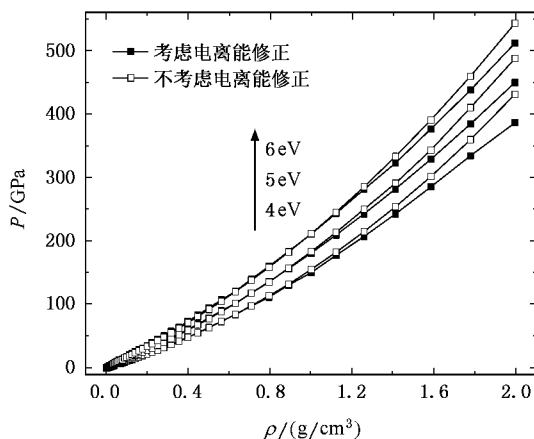


图 6 压强的等温变化曲线

可以看出,密度小于 0.9 g/cm^3 时,考虑电离能修正与不考虑电离能修正时压强的差别较小,密度大于 1.4 g/cm^3 时,差别变得明显起来,密度达到 2 g/cm^3 时,二者已相差数十个 GPa. 因此,在高温高密度部分电离区物态方程的计算中必须考虑非理想相互作用的影响.

图 7 给出了 He^{2+} 的浓度在不同温度下随密度的变化曲线. 可以看出, He^{2+} 的浓度随温度的升高而增大. 密度小于 0.02 g/cm^3 时, He^{2+} 随密度的增加而明显降低. 结合图 5 可以看出,当密度大于 0.02 g/cm^3 时, He^{2+} 离子浓度较低. 在温度小于 6 eV , 密度 $0.02\text{--}2 \text{ g/cm}^3$ 的区域主要发生的是一次电离,二次电离对热力学状态的影响较小,可以忽略不计.

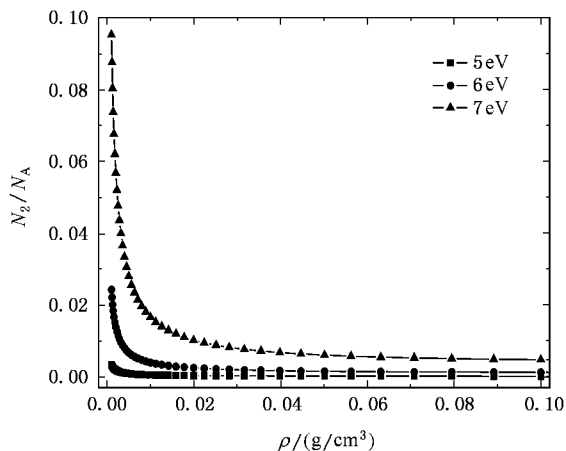


图 7 在不同温度下 He^{2+} 浓度随密度变化曲线

4. 结 论

本文提出的稠密流体自洽变分自由能模型考虑了各种粒子间相互作用对电离能的影响, 模型再现了已有的实验和理论的结果, 并用此模型预测了密度 10^{-3} — $10^{0.3}$ g/cm³ 和温度 4—7 eV 范围内的物态方程, 计算发现电离能的修正值在 0—0.2 g/cm³ 内增加较快, 在 0.4—2 g/cm³ 范围内基本呈线性增

加. 计算中还发现高温高密度氦电离能的降低主要是非理想相互作用引起的, 它也是导致出现压致电离的主要原因. 目前的模型考虑了氦原子的二次电离, 计算表明, 密度在 0.02—2 g/cm³ 范围内, 且温度小于 6 eV 时, He²⁺ 的浓度较低, He²⁺ 对热力学状态的贡献较小, 可以忽略. 此模型可适用于密度 0—2 g/cm³、温度小于 7 eV 区间的热力学状态参量的计算, 预测的结果可以对行星的结构模型以及冲击压缩实验提供参考.

-
- [1] Stevenson D J 1982 *Ann. Rev. Earth Planet. Sci.* **10** 257
- [2] Loubeyre P, Besson J M, Pinceaux J P *et al* 1991 *Phys. Rev. Lett.* **49** 1172
- [3] Mao H K, Hemley R J, Wu Y *et al* 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 2649
- [4] Willem L V, Mariëlle G E van Hinsberg, Jan A S 1990 *Phys. Rev. B* **42** 6106
- [5] Loubeyre P, Toullec R L, Pinceaux R J *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2272
- [6] Nellis W J, Holmes N C, Mitchell A C *et al* 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1248
- [7] Chen Q F, Cai L C, Gong Z Z, Jing F Q 2004 *AIP Conf. Proc.* **706** 33
- [8] Cai L C, Chen Q F, Gu Y J *et al* 2005 *Science in China G* **48** 695
- [9] Chen Q F, Sun Z H, Cai L C *et al* 2001 *Chin. Phys.* **10** 1144
- [10] Boronat J, Casulleras J 1994 *Phys. Rev. B* **49** 8920
- [11] Younger S M, Harrison A K, Sugiyama G 1989 *Phys. Rev. A* **40** 5256
- [12] Kahlbaum T, Förster A 1990 *Laser and Particle Beams* **8** 753
- [13] Förster A, Kahlbaum T, Ebeling W 1992 *Laser and Particle Beams* **10** 253
- [14] Saumon D, Chabrier G, Van Horn H M 1995 *Astrophys. J. Suppl.* **99** 713
- [15] Winsidoerffer C, Chabrier G 2005 *Phys. Rev. E* **71** 026402
- [16] Moore C E Atomic Energy levels, national bureau of standard circular, No. 35, Government Printing Office, Washington D. C., Vol. I, 1949, Vol. II, 1952.
- [17] Mansoori G A, Carnahan N F, Starling K E *et al* 1971 *J. Chem. Phys.* **54** 1523
- [18] Ross M 1979 *J. Chem. Phys.* **71** 1567
- [19] Ceperley D M, Partridge H 1986 *J. Chem. Phys.* **84** 820
- [20] Aziz R A, Nain V P S, Carley J S *et al* 1979 *J. Chem. Phys.* **70** 4330
- [21] Landau L D, Lifshitz E M 1980 *Course of Theoretical Physics* (Oxford: pergamon) 98
- [22] Stolzmann W, Blöcker T 1996 *Astron. Astrophys.* **314** 1024
Stolzmann W, Blöcker T 2000 **361** 1152
- [23] Saumon D, Chabrier G 1992 *Phys. Rev. A* **46** 2084
- [24] Reinholz H, Redmer R, Nagel S 1995 *Phys. Rev. E* **52** 5368
- [25] Ebeling W, Förster A, Richert W *et al* 1988 *Phys. A* **150** 159
- [26] David R L 2004 *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (Washington DC: CRC) 10—165

Self-consistent variational calculation of the dense fluid helium plasma in the region of partial ionization *

Zhang Ying^{1)‡)} Chen Qi-Feng^{1)†)} Gu Yun-Jun¹⁾ Cai Ling-Cang¹⁾ Lu Tie-Cheng²⁾

1) (*Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research , Institute of Fluid Physics , China Academy of Engineering Physics , Mianyang 612900 , China*)

2) (*Department of Physics , Sichuan University , Key Laboratory of Radiation Physics and Technology , Ministry of Education , Chengdu 610064 , China*)

(Received 21 March 2006 ; revised manuscript received 13 April 2006)

Abstract

The dense fluid helium will be ionized under high pressures and temperatures. The ionization energy of helium will be lowered as the result of interactions between all particles of He, He⁺, He²⁺, and e. In this paper, the thermodynamic parameters are obtained from nonideal ionization equilibrium, taking into account the correlation contributions to the chemical potential which is determined self-consistently by the free energy function. The theoretical equation of state (EOS) is verified by shock compression experiments and other theoretical calculations. The EOS of dense helium plasma are predicted and the contributions of interactions are discussed for the density and temperature range of 10⁻³—10^{0.3} g/cm³ and 4—7 eV, respectively. The calculations show that the pressure ionization is caused by the reduced ionization energy induced by the nonideal interactions, and the ionization energy should be corrected at high temperatures and densities.

Keywords : helium, equation of state, partial ionization plasma, self-consistent variation

PACC : 0570C, 6400, 6500

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674120) and the Foundation of Key Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 9140C67120206ZS7502).

† E-mail : Chen_qifeng@iapcm.ac.cn