

热动平衡态下热等离子体内的 离子丰度研究^{*}

孟续军 孙永盛 龙燕秋

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(1997 年 7 月 14 日收到; 1997 年 10 月 22 日收到修改稿)

用相对论哈特里-福克-斯莱特自洽场方法计算热等离子体内的原子结构和平均离化度, 应用玻耳兹曼关系和熵涨落理论, 对一定温度、物质密度下的热等离子体内的离子丰度作了细致的研究, 给出了一种快速求解离子丰度的物理方法, 研究了离子离化度、丰度的变化规律.

PACC: 5225; 0520; 3120

1 引 言

在各种热等离子体过程的模拟中, 热等离子体内的离子丰度, 即不同离化度所占的比份是十分重要的. 惯性约束聚变研究, 计算冕区等离子体吸收激光能量都需要平均离化度参数. 靶丸芯部出现聚变点火, 高能 α 粒子慢化, 烧蚀向内传播, 理论模拟这种过程时也需要离化度. 在电子热传导不透明度计算和韧致吸收不透明度计算中, 对离化度尤其敏感. 但是只计算原子平均离化度是不够的. 这是因为等离子体内不可能只存在一种离化度的离子. 为了能够精确计算各种离化度下的离子结构参数, 以及每种离化度下离子的贡献, 除了要求解丰度最大的离子的离化度外, 还必须知道其他离化度的离子所占的比份. 求解一些类某原子离子. 为了得到热等离子体内离子丰度和离化度, 目前比较常用的方法就是求解萨哈(Saha)方程或其他一系列离子离化平衡方程. 这类方法物理思想简洁明了, 计算结果也比较准确, 但真正应用到与实验有关的理论模拟中, 或是一旦用于模拟重元素等离子体就显得力不从心, 庞大的计算量令人望而止步. 因此, 在计算重元素方面, 在局部热动平衡状态下, 平均原子模型仍是计算离子离化度的主要方法^[1]. 由于平均原子模型给出的仅仅是一种“平均”的, 也可以说是“最可几”的离子结构. 有关离子类型的信息全部损失掉了, 不可能解决等离子体内的离子丰度问题.

在本文中, 我们基于哈特里-福克-斯莱特(Hartree-Fock-Slater)自洽场方法, 运用巨正则系综理论, 结合玻耳兹曼关系, 采用熵涨落理论, 导出了离子结构的电子占据数涨落与离子类型的关系, 以及该离子类型的出现概率, 利用卷积方法, 实现统计求和, 算出了离子的丰度. 这是一种快速、准确的求解方法. 本文第二部分给出详细的理论方法, 第三部分用

^{*} 国家自然科学基金、国家高技术研究发展计划和中国工程物理研究院基金资助的课题.

一些算例, 对该方法进行讨论. 除非特别说明, 本文采用原子单位制.

2 理 论

2.1 平均原子结构

详细求解平均原子结构模型可参看文献[1], 这里引用平均原子模型中的主要概念. 平均原子是一种等效原子, 是一种统计意义上的原子. 它能级上的电子占据数是分数, 由 Fermi-Dirac 统计分布确定. 通过自洽求解后, 对于第 i 个能级, 它被电子占据的概率为

$$f_i = \frac{1}{\exp((\epsilon_i - \mu)/T) + 1}, \quad (1)$$

其中 ϵ_i 是 i 轨道电子能量, μ 是化学势, T 是物质温度. 由于 f_i 是一种统计平均后的效果, 在它的附近一定存在涨落.

2.2 离子类型与出现概率

从统计物理的角度, 平均原子是“最可几”原子. 热等离子体中的自由电子由于是非局域的, 数目极大, 能够严格遵循统计分布, 相对涨落很小, 可以作为背景处理. 能级上的电子则是局域的, 数目极其有限, 它在原子胞内的涨落是相当可观的. 这种涨落构成了不同离子化度下的不同离子类型. 这种离子类型的出现概率构成了离子丰度问题. 热物质中的离子完全是一种开放系统. 依据巨正则系综理论, 离子熵可以写为

$$S = k[-f_i \ln f_i - (1 - f_i) \ln(1 - f_i)], \quad (2)$$

其中 k 为玻耳兹曼常量.

如果由于涨落, 电子对轨道的占据概率 f_i 发生改变 Δf_i 时, 离子熵的相应改变为

$$\begin{aligned} S = S_0 + \sum_i \frac{\partial S}{\partial f_i} (\Delta f_i) + \frac{1}{2!} \sum_i \frac{\partial^2 S}{\partial f_i^2} (\Delta f_i)^2 \\ + \frac{1}{3!} \sum_i \frac{\partial^3 S}{\partial f_i^3} (\Delta f_i)^3 + \frac{1}{4!} \sum_i \frac{\partial^4 S}{\partial f_i^4} (\Delta f_i)^4 + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

在平衡态约束条件下, $\sum_i f_i \omega_i = \bar{N}$ (束缚电子数), $\sum_i f_i \omega_i \epsilon_i = \bar{U}$ (内能), 只有当 f_i

取 Fermi-Dirac 统计值时, 系统的熵最大, 即 $\frac{\partial S}{\partial f_i} = 0$. 依据玻耳兹曼关系 $S = k \ln W$, 以电子占据方式为 $\{f_i + \Delta f_i\}$ 的离子类型的出现概率可以写为

$$W(\{\Delta f_i\}) \propto \prod_i \exp \left[-\frac{\omega_i (\Delta f_i)^2}{2 f_i (1 - f_i)} \left(1 + \frac{f_i - (1 - f_i)}{3 f_i (1 - f_i)} (\Delta f_i) + \frac{1 - 3 f_i + 3 f_i^2}{6 f_i^2 (1 - f_i)^2} (\Delta f_i)^2 \right) \right], \quad (4)$$

其中 ω_i 为第 i 个能级的简并度.

若以电子占据数据分布 $\{N_i + \Delta N_i\}$ 来表示这个概率, 则需作代换

$$\Delta f_i = \frac{\Delta N_i}{\omega_i}, \quad \Delta N_i = A_i - N_i, \quad (5)$$

其中 N_i 是第 i 轨道上由平均原子给出的电子占据数, A_i 是该轨道的任意电子占据数.

由于所有的 Δf_i 是相互独立的, 所以

$$W(\{\Delta f_i\}) = \prod_i W_i(\Delta f_i) = \prod_i W_i(\Delta N_i), \quad (6)$$

$W_i(\Delta N_i)d(\Delta N_i)$ 表示第 i 个能级上的电子占据数为 $\{N_i + \Delta N_i\}$ 时的出现概率, 它的表达式为

$$W_i(\Delta N_i) = C_i \exp \left[-\frac{(\Delta N_i)^2}{2f_i(1-f_i)\omega_i} \left(1 + \frac{(4f_i-2)(\Delta N_i)}{6f_i(1-f_i)\omega_i} + \frac{4(1-3f_i+3f_i^2)(\Delta N_i)^2}{6[2f_i(1-f_i)\omega_i]^2} \right) \right], \quad (7)$$

其中 C_i 是归一化常量, 由下式求出:

$$\int_{-N_i}^{\omega_i - N_i} W_i(\Delta N_i)d(\Delta N_i) = 1. \quad (8)$$

2.3 离子丰度

当离子某个能级上的电子数发生改变时, 离子的离化度发生改变, 同时离子丰度也有相应的改变. 对所有能级上电子涨落的贡献进行统计求和便构成了离子离化度和丰度问题. 由于涨落, 离子束缚电子数的变化为各能级上电子数变化之和,

$$\Delta N = \sum_i \Delta N_i. \quad (9)$$

设在离子的所有能级中, 只有 i, k 两个能级上的电子数发生了涨落,

$$\Delta N = \Delta N_i + \Delta N_k, \quad (10)$$

那么电子数发生变化 ΔN 的概率 $W(\Delta N)d(\Delta N)$ 可由卷积的方法获得

$$W(\Delta N)d(\Delta N) = d(\Delta N) \int W_i(\Delta N_i) W_k(\Delta N - \Delta N_i)d(\Delta N_i). \quad (11)$$

假设所有的能级上都有电子数变化, 且前 $k-1$ 个 $\{W_i(\Delta N_i)d(\Delta N_i)\}$ 已经根据(11)式合成中间结果

$$W^{(k-1)}(\Delta N^{(k-1)})d(\Delta N^{(k-1)}),$$

其中

$$\Delta N^{(k-1)} = \sum_{i=1}^{k-1} \Delta N_i, \quad (12)$$

那么合成 $\Delta N^{(k)} = \sum_{i=1}^k \Delta N_i$ 的 $W^{(k)}(\Delta N^{(k)})d(\Delta N^{(k)})$, 可用反复卷积的方法获得

$$W^{(k)}(\Delta N^{(k)})d(\Delta N^{(k)}) = d(\Delta N^{(k)}) \int W^{(k-1)}(\Delta N^{(k)} - \Delta N_k) W_k(\Delta N_k)d(\Delta N_k). \quad (13)$$

当 k 取完所有的能级时, $\Delta N^{(k)}$ 便成为 ΔN , $W^{(k)}(\Delta N^{(k)})d(\Delta N^{(k)})$ 便是束缚电子数总涨落为 ΔN 时的出现概率 $W(\Delta N)d(\Delta N)$, 当然 $W(\Delta N)$ 是自动归一化的.

对于平均原子, 总束缚电子数 N_b 为

$$N_b = \sum_i N_i. \quad (14)$$

对于原子序数为 Z 的原子,其离化度 Z_i 可表示为

$$Z_i = Z - N_b - \Delta N_i \tag{15}$$

那么某个离化度 Z_i 的离子出现在等离子体内的概率为

$$= W(Z - N_b - Z_i)dZ_i$$

式中负号表示离化度增加的方向与束缚电子增加的方向相反,如果我们只关心在 $Z_i \rightarrow Z_i + dZ_i$ 这个离化度范围内的离子丰度,可以通过变换,使得

$$W_f(Z_i) = W(Z - N_b - Z_i), \tag{16}$$

从而获得了某个离化度附近离子的丰度 $W(Z_i)dZ_i$.很明显, $W(Z_i)$ 是自动归一的.

下面对 $W(Z_i)$ 进行简单的分析.

由(7)式可看出, $W_i(\Delta N_i)$ 具有与高斯函数类似的形式,尽管 ΔN_i 的上下限是有限值.经过卷积计算后 $W(Z_i)$ 的主要形状仍可认为具有类似高斯函数的形式.将 $W(Z_i)$ 进行高斯形式的拟合

$$f(Z_i) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Gamma_i} \exp[-(Z_i - \bar{Z}_i)^2 / \Gamma_i^2], \tag{17}$$

其中 Γ_i 可看作是“宽度”, $\bar{Z}_i$ 是最大的离化度.注意: $\bar{Z}_i$ 已经不是平均原子给出的结果,而是在平均原子的结果上又附加了一个修正.

通过(17)式的拟合,可以把一定温度、密度下等离子体的离化属性以最少的参数保存下来.在实际工作中,可能用到整数的 Z_i ,这也不要紧, $f(Z_i)$ 给出的相对概率, Γ_i^2 描述的是离化度的散布范围,只需将(17)式中的 $\bar{Z}_i$, Z_i 取为整数,重新归一化即可得到整数形式的离化度及其丰度.

3 计算与讨论

鉴于 Au 元素在惯性约束聚变研究中的特殊地位,考虑实际需要,我们对给出温度 $T=20\text{--}20 \times 10^3 \text{ eV}$, 密度压缩比 $\sigma=0.1\text{--}100$ 范围的计算结果进行了讨论.

表 1 Au 原子的平均离化度 Z_i

$Z_i \backslash \sigma$	0.1	0.2	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	20.0	50.0	100.0
T/keV										
0.02	4.746	4.679	4.745	4.211	4.613	4.884	11.24	29.00	33.00	43.00
0.05	10.05	9.903	9.602	9.752	10.08	9.447	13.56	29.01	33.00	43.00
0.10	16.54	15.93	15.41	15.02	15.66	15.07	17.50	29.28	33.02	43.00
0.20	25.81	24.53	22.77	22.24	22.01	22.45	23.56	27.59	33.62	43.02
0.30	32.98	31.18	29.05	28.03	26.54	27.81	28.14	28.76	34.91	43.14
0.50	42.94	40.81	37.98	36.34	34.94	34.03	33.22	34.45	37.93	43.85
1.00	58.15	55.26	51.89	49.39	47.25	44.67	43.43	42.97	44.58	47.14
2.00	68.53	67.19	64.95	62.94	60.80	58.11	55.90	54.34	51.67	54.04
5.00	76.68	76.39	75.62	74.79	73.69	71.81	70.04	67.77	65.65	63.91
10.0	78.05	77.67	77.15	76.78	76.41	75.90	75.20	74.59	73.27	71.30
20.0	78.97	78.95	78.87	78.79	78.66	78.38	78.04	77.63	76.86	75.85

表 1 给出 Au 原子的平均离化度,该表中的离化度没有考虑离子丰度的影响,是完全平均原子的结果.关于平均离化度随温度、物质密度变化规律的讨论,有兴趣者可见文献[1].

表 2 Au 原子的最大离化度 $\bar{Z}_l$

$\bar{Z}_l \backslash \sigma$	0.1	0.2	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	20.0	50.0	100.0
T/keV										
0.02	3.379	3.879	4.564	4.133	<u>5.237</u>	5.678	11.54	29.00	33.00	43.00
0.05	8.011	8.727	9.185	<u>9.929</u>	10.83	10.61	14.62	29.05	33.00	43.00
0.10	12.77	13.06	13.74	14.08	<u>15.69</u>	15.83	18.80	29.63	33.08	43.00
0.20	20.81	20.24	19.23	19.88	20.73	<u>22.62</u>	24.52	28.89	34.15	43.06
0.30	26.84	25.66	24.58	24.71	23.92	27.52	<u>28.65</u>	29.82	35.84	43.35
0.50	36.26	34.18	31.90	31.33	31.16	32.12	32.35	<u>34.91</u>	39.10	44.51
1.00	53.61	49.62	46.28	44.05	42.65	41.25	41.34	42.14	<u>45.43</u>	48.47
2.00	66.44	63.82	60.02	57.35	55.06	53.20	51.87	51.60	50.60	<u>54.58</u>
5.00	75.74	74.91	73.07	71.58	70.03	67.99	66.39	64.37	63.40	62.34
10.0	77.66	77.23	76.34	75.61	74.89	73.96	72.76	72.00	70.58	68.44
20.0	78.81	78.68	78.37	78.11	77.76	77.24	76.68	76.22	75.45	74.19

表 2 给出了经过离子类型修正后的最大离化度 $\bar{Z}_l$. 仔细比较表 1 与表 2 会发现:考虑离子类型的贡献后,最大离化度 $\bar{Z}_l$ 较平均原子的离化度有所移动. 在一定温度下,低于某个压缩比的 $\bar{Z}_l$ 小于平均原子的离化度;大于这个压缩比后 $\bar{Z}_l$ 大于平均原子的离化度. 随着等离子体温度的升高,分界处的压缩比向高压压缩比推进. 这个规律可以从表 2 的带横线的数据看到,在一定的温度下,压缩比越小, $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度的差别就越大. 随温度的变化规律是:在低温、高温情况下, $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度的差别不是很大;在中等温度段, $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度的差别很大. $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度的差别随压缩比的增加减小;当压缩比达一定值以后 $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度的差别消失. 下面给出对该现象的解释. 通过(7)式可以发现:如果 $f_i \leq 0.5$, 即不够半填满, 则该能级上电子占据涨落倾向于填充, 减少离化度. 如果 $f_i \geq 0.5$, 即超过半填满, 则电子涨落倾向于失掉电子, 增大离化度. 当密度较低时, 许多能级的电子占据数很小, 则电子回填轨道的倾向性很大, 这样导致最大离化度小于最可几原子的离化度. 随着密度的增大, 电子被压回轨道, $f_i \geq 0.5$ 的轨道数增多, 束缚电子倾向于失掉, 压倒了高壳层中得到电子的倾向, 因而统计平均后表现为最大离化度大于最可几原子的离化度. 但是随着压缩比的增加, 束缚轨道数会减少, 轨道会被电子填满, 这时发生涨落的可能性越来越小, 最后没有涨落, 这时 $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度趋于一致. 温度的作用在于离化掉轨道上的电子, 增加轨道数. 随着温度越来越高, 能级变得越来越空, $f_i \ll 1$, 这时已无多少电子涨落可言, $\bar{Z}_l$ 与平均原子的离化度又趋于一致. 这种涨落之间的互相竞争, 在中等温度、物质密度情况下变得十分复杂.

表 3 给出了表征热等离子体离子丰度的特征宽度 Γ_i . 通过表 3 可以简明地看到涨落的程度. 涨落的特征“宽度” Γ_i 越大, 表明等离子体内, 离子类型越多、越复杂. 这类问题是导致辐射不透明度计算的最大难点.

表 3 Au 的离化丰度散布“宽度” Γ_i

$\Gamma_i \backslash \sigma$	0.1	0.2	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	20.0	50.0	100.0
T/keV										
0.02	2.401	2.398	2.389	2.471	1.171	1.956	0.295	0.000	0.000	0.000
0.05	2.999	3.007	3.066	2.912	2.813	2.757	1.573	0.032	0.000	0.000
0.10	3.396	3.477	3.516	3.565	3.332	3.356	2.584	0.327	0.051	0.000
0.20	3.631	3.744	3.913	3.964	3.913	3.704	3.273	2.055	0.598	0.041
0.30	3.549	3.720	3.943	4.048	4.198	3.879	3.603	3.274	1.290	0.205
0.50	2.416	2.781	3.255	3.567	3.807	3.930	3.945	3.554	2.184	0.734
1.00	2.651	2.830	3.042	3.204	3.387	3.638	3.753	3.661	2.868	1.829
2.00	0.991	1.013	1.388	1.833	2.321	2.904	3.297	3.521	3.760	2.862
5.00	0.191	0.315	0.589	0.885	1.244	1.709	2.020	2.367	2.691	2.867
10.0	0.820	0.803	0.632	0.472	0.400	0.498	0.734	0.973	1.502	2.068
20.0	0.027	0.046	0.092	0.151	0.244	0.434	0.630	0.816	0.957	1.125

图 1 至图 4 是 Au 元素分别在 $T=20\text{ eV}, \sigma=0.1$; $T=20\text{ eV}, \sigma=10.0$; $T=200\text{ eV}, \sigma=10$; $T=20\text{ keV}, \sigma=100$ 四种情况下的离子丰度图. 图中的竖线代表最可几原子(即平均原子)给出的离化度位置. 不难看到, 经过统计平均之后, 等离子体的离化度已经严重

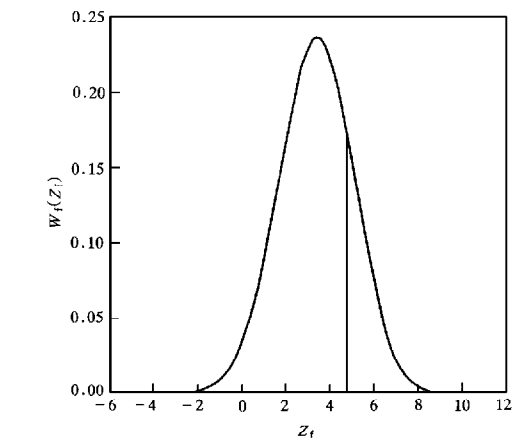


图 1 Au, $T=20\text{ eV}, \sigma=0.1$

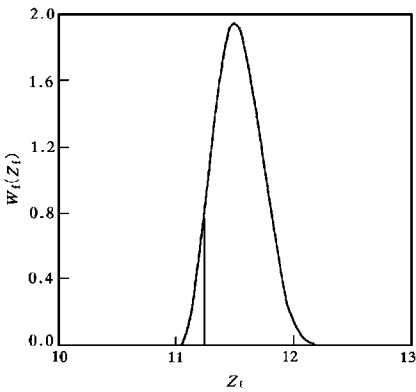


图 2 Au, $T=20\text{ eV}, \sigma=10.0$

偏离“最可几”原子的结果, 它表明, 在一些细致模拟等离子体过程的模型中, 只考虑一种离化度是远远不够的. 这也说明, 平均原子给出的离化度的用途是有限的. 为了保存计算结果, 我们采用了最接近实际计算的高斯型((17)式). 通过表 2 和表 3 中相互对应的 $\bar{Z}_i$

与 Γ_i 便可在较大的范围内计算 Au 元素在某种温度、密度下的离子丰度。(17) 式提供的离化度是连续的, 需要把 Z_i 取整: 在 $\bar{Z}_i$ 附近以 Γ_i 为基本尺度将 Z_i 取整数值. 由于 (17) 式并未对 Z_i 的范围有严格的限制, 可以依据一定的精度选取一系列离散的 $\{Z_i^{(i)}\}$, 得到一组离散的 $\{f(Z_i^{(i)})\}$. 进行求和后, 对 $f(Z_i^{(i)})$ 重新进行归一化就可得到某种离化度的离子丰度 $f(Z_i^{(i)})/\sum_i f(Z_i^{(i)})$. 这里, 比较重要的是表 2 和表 3 中的数据为某些计算选取离子类型提供了极其有用的参考数据.

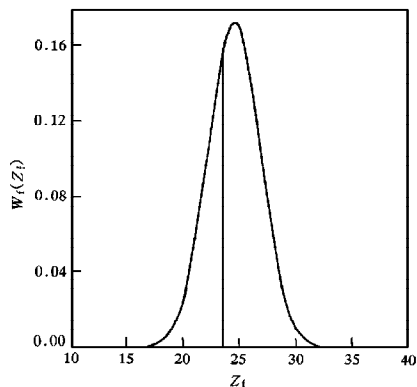


图 3 Au, $T=200$ eV, $\sigma=10.0$

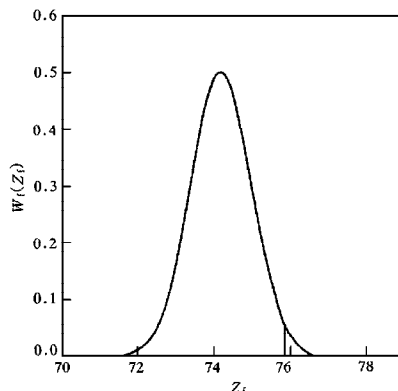


图 4 Au, $T=20$ keV, $\sigma=100.0$

[1] Meng Xu-jun, Sun Yong-sheng, *Acta Physica Sinica*, **43**(1994), 345 (in Chinese).

STUDY OF IONIC ABUNDANCE FOR LTE PLASMAS *

MENG XU-JUN SUN YONG-SHENG LONG YAN-QIN

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088*)

(Received 14 July 1997; revised manuscript received 22 October 1997)

ABSTRACT

In this paper a detailed study is performed to the ionic abundance in hot plasmas at definite temperatures and densities of matter by employing both the theory of fluctuation of entropy and Boltzmann relation on the relativistic Hartree-Fock-Slater self-consistent field average atomic model. A convolution method for fast calculation of ionic abundance is presented. The degree of ionization and ionic abundance following the changes of temperature and density of matter is discussed by taking gold as an example.

PACC: 5225; 0520; 3120

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China and the National High Technology Development Program of China and the China Academy of Engineering Physics.