

惰性物质等离子体物态方程研究*

田杨萌^{1)†} 王彩霞¹⁾ 姜 明²⁾ 程新路³⁾ 杨向东³⁾

1) 北京信息工程学院基础部, 北京 100101)

2) 西南民族大学物理系, 成都 610064)

3) 四川大学原子分子物理研究所, 成都 610065)

(2007 年 1 月 9 日收到, 2007 年 2 月 11 日收到修改稿)

对高温高压下惰性等离子体的电离度和物态方程, 给出了一种基于 Thomas-Fermi (TF) 统计模型的简化计算新方法, 即首先对 TF 模型电离势的数值结果进行函数逼近, 得出近似计算电离势的简单解析函数; 在局部热动平衡情况下, 假定离子数密度 $n(Z^*)$ 为 Z^* 的连续函数, 再由 Debye-Hückel 修正的 Saha 方程, 得出了一个便于数值求解的电离度的近似计算公式, 从而建立了一种惰性等离子体物态方程的简化模型, 并对氦、氖、氙三种惰性物质等离子体进行了计算. 计算结果与其他文献计算结果和实验值均符合很好. 所提出的简单模型也适用于计算混合物物态方程. 在高温高密度强电离等离子体领域将有更为广阔的应用前景.

关键词: 等离子体, 物态方程, 电离势, 电离度

PACC: 3120, 3120L, 5225K

1. 引 言

研究气体高温高压离化状态下的流体动力学过程, 必须知其物态方程. 高温高压下等离子体的物态方程研究在电磁发射技术、磁流体发电机、受控核聚变、恒星演化、实验室等离子体、惯性约束系统等方面都具有广泛的应用. 惰性物质等离子体的物态方程有多种计算方法, 如 Saha 方程模型、Thomas-Fermi (TF) 统计模型、Abe 离子数密度展开法^[1]、活度展开法等^[2]; 平均电离度也有多种计算方法, 如平均离子模型^[3-5]和离子组态速率方程方法等. 但这些方法在计算时, 都需求解庞大的非线性耦合常微分方程组. 如等离子体为混合物, 则求解更加复杂. 在工程技术和自然科学的数值计算中, 惰性气体在高温高压条件下的应用^[6,7]很多, 平均电离度和物态方程形式都需尽可能简单. 因此在处理很多实际问题时, 常需提出简化实用模型, 寻求近似方法, 定量模拟, 使计算结果在满足一定精度要求的同时使计算大大简化.

本文提出了一种基于 TF 统计模型和 Saha 方程的计算惰性物质等离子体平均电离度和物态方程的

简单模型. 首先, 把 TF 统计模型中计算电离势的数值解析函数通过函数逼近, 给出近似计算电离势的简单解析函数, 然后联立 Saha 方程模型^[8], 得出计算惰性物质等离子体电离度近似表达式. 由此简化模型计算了局部热动平衡下氦、氖、氙三种等离子体的电离度和物态方程, 计算结果与实验数据及其他理论模型的计算结果均吻合较好. 该模型在进行流体力学数值计算时非常方便.

2. TF 模型计算平均电离势

在 TF 统计模型中, 电子势能由电子与原子核之间的相互作用势能 E_{en} 和电子与电子之间的相互作用势能 E_{ee} 两部分组成, 总势能 $E_p = E_{en} + E_{ee}$, 具体表达式^[8]为

$$E_p = \frac{ZkT\alpha}{2\phi(0)} \int_0^1 I_{1/2} \left(\frac{\phi(x)}{x} \right) \times [\phi(x) - x\phi(1) + \phi(0)] x dx. \quad (1)$$

当第 $Z^* + 1$ 个电子被电离时, 平均电离势由 TF 模型给出(见文献[9]附录), 近似定义为

$$\bar{I} \left(\frac{Z^*}{Z} \right) = \frac{E_p}{Z - Z^*} = -Z^{4/3} I_0 \left(\frac{Z^*}{Z} \right), \quad (2)$$

* 国家高技术研究发展计划(863)批准号: 2002AA831083 和北京市教育委员会科技发展计划项目(批准号: KM200510772005)资助的课题.

† E-mail: ymtian@biti.edu.cn

其中

$$I_0\left(\frac{Z^*}{Z}\right) = \frac{4m_e e^4}{h^2} \left(\frac{2\pi^2}{\alpha \phi^2(0)}\right)^{2/3} \int_0^1 I_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) \times [\phi(x) - x\phi(1) + \phi(0)] x dx \times \left[\int_0^1 x^2 dx \int_0^{\frac{\phi(x)}{x}\phi(1)} \frac{y^{1/2} dy}{1 + \exp\left(y - \frac{\phi(x)}{x}\right)} \right]^{-1} \quad (3)$$

(1)–(3) 式中，

$$\alpha = \frac{(4\pi e R_0)^2}{h^3} (2m_e)^{3/2} (kT)^{1/2},$$

$$\frac{\phi(x)}{x} = \frac{eU(r) + \mu}{kT},$$

$$\phi(0) = \frac{Ze^2}{kTR_0}, \quad \phi(1) = \frac{\mu}{kT},$$

$I_n(\xi)$ 为费米函数, $x = \frac{r}{R_0}$ ($0 \leq r \leq R_0$), R_0 为原子球等效半径, $U(r)$ 为势能函数, $\phi(x)$ 为 TF 方程无量纲化引入的变量 (见文献 [9] 附录), Z 为原子序数, Z^* 为电离度, k 为玻耳兹曼常数, T 为温度, e 为电子电量, m_e 为电子质量, h 为普朗克常数, μ 为化学势。

More^[10] 对方程 (3) 进行数值求解, 并把 30 种原子的计算结果与 Hartree-Fock-Slater 的计算结果进行了比较。为计算方便和实际应用, 根据 More 计算的平均电离势 \bar{T}_{TF} , 本文拟合了平均电离势 \bar{T}_{TF} 随 Z^*/Z 的变化曲线。

由于类氢孤立原子电离势 $I = -13.6 \frac{Z^{*2}}{n^2}$, 且

$$\text{到 } n \text{ 壳层为止总束缚电子数 } Z - Z^* = \int_0^n 2n_1^2 dn_1 =$$

$\frac{2}{3} n^2$, 故

$$I = -10.4 \frac{Z^{4/3} x^2}{(1-x)^{2/3}}, \quad (4)$$

单位为 eV, 且 $x = \frac{Z^*}{Z}$ 。

由 More 计算的平均电离势分布规律及 (4) 式, 本文拟合函数选取指数形式

$$I = -10.4 Z^{4/3} \exp(ax^3 + bx^2 + cx + d) \text{ (eV)},$$

拟合出参数后,

$$I = -10.4 Z^{4/3} \exp(11.9698x^3 - 21.4752x^2 + 16.7423x - 4.9909), \quad (5)$$

(5) 式单位为 eV, 该式计算结果与 More 的计算结果

的对比如图 1, 从图中看出两种计算结果符合较好。

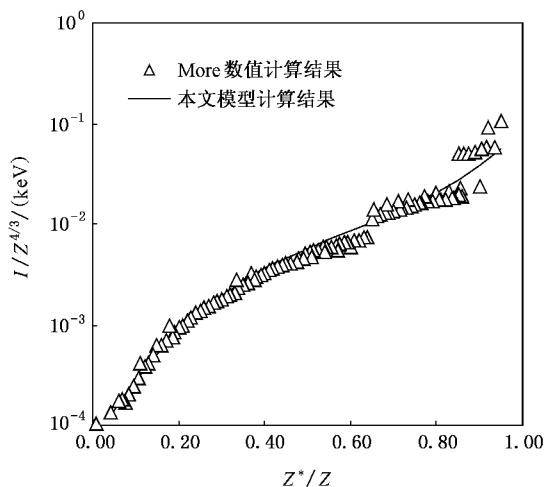


图 1 电离能拟合曲线与 More 数据比较

3. 计算平均电离度

在局部热动平衡 (LTE) 情况下, 电离度可用 Debye-Hückel 修正^[11] 的 Saha 方程进行描述:

$$\frac{n(Z^* + 1)n_e}{n(Z^*)} = 2 \frac{u_{Z^*+1}}{u_{Z^*}} \left(\frac{2\pi kT m_e}{h^2}\right)^{3/2} e^{-T(Z^*+1)/kT}, \quad (6)$$

其中离子的统计权重比值 u_{Z^*+1}/u_{Z^*} 变化极不规则, 但总近似等于 1, 因此近似取为 1。

为得到平均电离度 \bar{Z}^* 的表达式, 假设数密度 $n(Z^*)$ 是 Z^* 的连续函数, 即

$$n(Z^* + 1) = n(Z^*) + \frac{dn}{dZ^*}, \quad (7)$$

(7) 式是一微分表达式, 数密度 $n(Z^*)$ 在峰值处 $\frac{dn}{dZ^*} = 0$, 则 $n(Z^* + 1) = n(Z^*)$, 且

$$n_e = 2 \left(\frac{2\pi kT m_e}{h^2}\right)^{3/2} e^{-T(Z^*+1)/kT}. \quad (8)$$

离子的平均电离度 \bar{Z}^* 定义为 $\bar{Z}^* = \frac{n_e}{n_i}$, n_i 是等离子体的离子数密度, n_e 是自由电子数密度。由方程 (8) 可得

$$\bar{Z}^* = \frac{AT^{3/2}}{n_i} e^{-T(Z^*+1)/kT}, \quad (9)$$

其中 $A = 2 \left(\frac{2\pi k m_e}{h^2}\right)^{3/2} = 4.8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{K}^{-3/2}$ 。由于方程 (9) 中的 Z^* 对应函数 $n(Z^*)$ 中的峰值, 且它也

随温度和密度变化,所以可近似用峰值处的 Z^* 取代式中的 \bar{Z}^* ;另根据文献 [10], $\bar{I}(Z^* + 1)$ 可用第 Z^* 和 $Z^* + 1$ 次电离离子的平均电离势 $\bar{I}(Z^*)$ 和 $\bar{I}(Z^* + 1)$ 的中间值 $\bar{I}(Z^* + 1/2)$ 取代. 然后对上式

$$\bar{Z}^* = Z^* = \frac{AT^{3/2}}{n_i \exp\left[\frac{0.1206Z^{4/3} \times 10^6}{T} \exp(11.9698X^3 - 21.4752X^2 + 16.7423X - 4.9909)\right]}, \quad (11)$$

其中 $X = \frac{Z^* + 1/2}{Z}$.

4. 惰性等离子体物态方程

电离气体的状态方程用如下形式: $P = P(\rho, T)$. 对于压强 P , 要考虑各级离子、原子和电子热运动贡献. 设各级离子和原子的热运动对压强的贡献为 P_N , 自由电子的热运动对压强的贡献为 P_e . 则电离气体的压强为

$$P = - \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_T = P_N + P_e,$$

其中 $P_N = \frac{\rho R}{M} T$, $P_e = Z^* \frac{\rho R}{M} T$, M 为等离子体摩尔质量, ρ 为等离子体密度, 则总的热压为

$$P = (1 + Z^*) \frac{\rho R}{M} T. \quad (12)$$

上述计算方法方便实用,能用于计算工程技术中的物态方程. 如果工作物质是多种原子的混合物, 混合物等离子体的物态方程为

$$P = \sum_i (1 + Z_i^*) \frac{\rho_i R}{M_i} T. \quad (13)$$

5. 结 果

根据本文所提的简单模型,用(12)式和近似计算公式(11)式对氦、氖、氙三种等离子体的物态方程进行了计算.

5.1. 与实验结果比较

由于氖缺乏实验数据,此处只对氦和氙的计算结果与实验值进行比较. 图 2 为本文模型对氦的计算结果与实验结果^[12]及文献 [12] 中的计算结果的比较,氙的计算结果与实验结果^[9,13]及 Saha 方程模型的计算结果的比较见图 3. 由图 2 和图 3 知,氙和

取对数得

$$\bar{I}(Z^* + 1/2) = kT \ln \frac{AT^{3/2}}{Z^* n_i}. \quad (10)$$

将(5)和(10)式联立,可得到关于温度 T 和离子数密度 n_i 的计算平均电离度 \bar{Z}^* 的迭代公式,

氦的计算结果均与实验结果吻合较好. 虽然氖缺乏实验数据,但由于氦、氖、氙同属惰性气体,故有理由认为本模型对氖等离子体的计算结果也是可信的.

5.2. 与其他理论的计算结果比较

将本文模型对氦、氖、氙三种等离子体的计算结果与文献报道的其他理论的计算结果相比较,见表 1—3. 从表中看出,本文模型计算结果与 Saha 模型和其他理论计算结果均吻合较好.

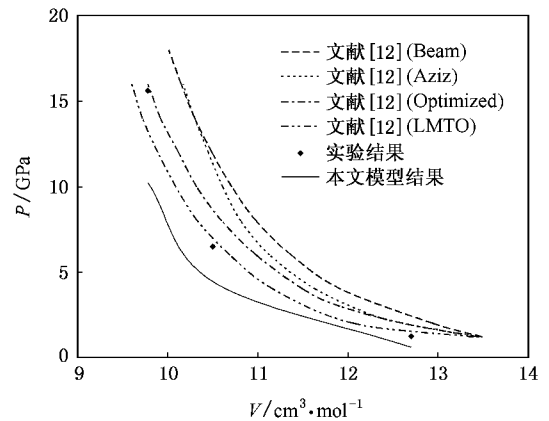


图 2 氦等离子体的 P - V 曲线

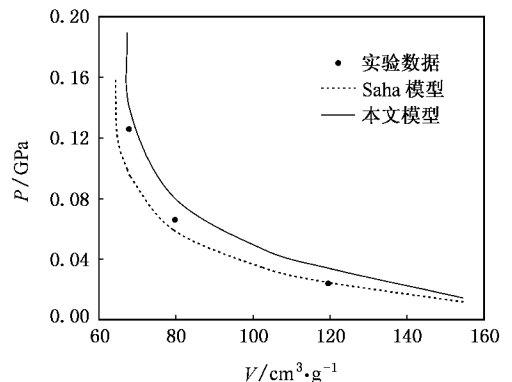


图 3 氙等离子体的 P - V 曲线

表 1 氦等离子体物态方程计算结果($P_0 = 0.1 \text{ MPa}$)

$T/10^4 \text{ K}$	ρ/ρ_0	压强 $P/10^5 \text{ Pa}$			本文模型和 Saha 模型压强相对误差/%
		本文模型	文献 [14]	Saha 模型 ^[14]	
2	4.30	413	319	323	27.9
6	8.31	3339	3450	3509	4.8
10	8.24	6301	7150	7279	13.4
14	8.04	9172	11500	11665	21.4
20	6.87	11824	14900	15014	21.2
30	5.96	16148	19600	19795	18.4

表 2 氖等离子体物态方程计算结果($P_0 = 0.1 \text{ MPa}$)

$T/10^4 \text{ K}$	ρ/ρ_0	压强 $P/10^5 \text{ Pa}$			本文模型和 Saha 模型压强相对误差/%
		本文模型	文献 [14]	Saha 模型 ^[14]	
2	5.21	649	387	407	59.5
6	9.17	5619	4440	4721	19.0
10	9.15	11856	10600	10700	10.8
14	9.11	19357	18800	18740	3.29
20	9.01	32490	33900	34440	5.66

表 3 氩等离子体物态方程计算结果

$T/10^3 \text{ K}$	ρ/ρ_0	P/GPa		本文模型和 Saha 模型压强相对误差/%
		本文模型	Saha 模型 ^[15]	
10.0	3.97	0.0145	0.0133	9.02
14.8	5.12	0.0339	0.0266	27.4
16.5	6.00	0.0471	0.0366	28.7
19.9	7.74	0.0814	0.0657	23.9
25.0	9.00	0.1377	0.120	14.8
30.0	9.11	0.1896	0.166	14.2

6. 讨 论

对计算结果进行对比分析知,对氦、氖、氩三种等离子体,本文模型计算结果与实验数据及其他理论计算结果均符合较好,说明本文所提出的简单模型能够较好地描述惰性物质等离子体的热力学性质.原因分析如下:

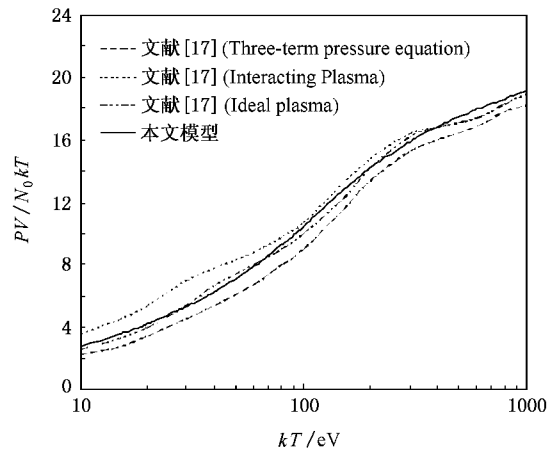
1)通常认为 TF 模型是提供高密区域物态方程的有效方法,而低温低密区的物态方程计算通常采用 Saha 模型方法.但据文献 [16] 报道,对 TF 统计模型修正后可用于低温低压区.在低温低压和高密过渡区,因物理过程较复杂,模型难以建立,其物态方程的计算通常采用拟合的方法.本文计算的等离子体,其温度和密度范围恰属于低温低压区及低温低压和高密过渡区,故使用 TF 模型加之 Saha 模型对

该区域内的单原子物质等离子体物态方程进行拟合应是有理的.

2)将由本文模型计算的氦、氖数据和其他理论计算结果及实验结果(仅对氦)对比可知,本文模型的计算结果要比其他理论结果和实验结果(仅对氦)大.这是因为本文拟合的电离势,是由简单 TF 理论算得的,没做任何修正;另外本文在对电离能进行拟合时也带来了一定误差.因此要得到更加精确的结果并扩大其适用范围,必须对本文模型进行进一步的完善,考虑对 TF 理论进行修正,如交换效应、量子交换修正和壳层结构修正.但这些修正对压强的贡献为负,所以修正后的压强应比修正前小^[16],更为接近实际值.

3)从图 2,3 可以看出,由本模型计算的氦结果和其他理论计算结果及实验结果比较,数据偏小,且比氖结果偏差大.这是因为本文模型推导过程中作了离子的数密度 $n(Z^*)$ 是离子电荷数 Z^* 的连续函数的假定,所以该模型应更适合于高 Z 物质.故对于低 Z 的氦来说,出现误差偏大是合理的.

4)本文模型推导过程中把电离离子的数密度 $n(Z^*)$ 看成是离子电荷数 Z^* 的连续函数,所以该模型应更适合于高温高压高电离状态.从表 2 及表 3 中能够看出,随着温度的升高本模型与 Saha 模型计算结果的相对误差明显减小.为充分说明该结果,本文还对高温时氩等离子体的物态方程进行了计算,并与文献 [17] 结果进行了比较,见图 4.由图 4 可知,本文模型在高温条件下与其他理论均符合很好,且与理想等离子体模型(对应图 4 中的 Ideal plasma 线)结果吻合最好,这是因为在超高温条件下,TF 模型理论中的电子将从 Fermi-Dirac 分布过渡

图 4 氩等离子体的 $pV/N_0 kT-kT$ 曲线

到 Maxwell-Boltzmann 分布,物态方程能自动过渡到全电离的理想等离子体物态方程^[18].

5) Saha 方程模型的 Debye-Hückel 修正对压强的贡献为负,故 Saha 模型在温度高于某一定值后(设密度一定)将会出现总的热压为负的情况^[16].而本模型不会出现这样的结果,因(11)式中等号右边不会出现负值,即算出的 Z^* 不会出现负值.故在 Saha 模型产生负压区时,本文模型仍可用于描述等离子体物态方程,本文模型比 Saha 方程模型适用的温度和密度范围更广,不但可以用于描述高密度物质物态方程,也可用于描述高温低密度物态方程^[18].而 Saha 模型的理想适用对象是低密度的稀薄

气体,经修正后可适用于较高温度和密度的气体^[19].

综上所述,本文模型是一种基于 TF 理论计算结果拟合式和离子数密度 $n(Z^*)$ 为连续函数的半经验表达式,简单、直观,易于计算,适合于流体力学的实际计算,在建立工程模型和进行数值计算时非常方便实用.本文模型更适用于高温高压高 Z 范围,它在强电离等离子体中应有更好的应用.但应注意,如果要计算的物质等离子温度和压强较低及原子序数较低,必须对本模型进行修正,否则将得不到合理的结果.相信该模型在建立工程模型和强电离等离子体中的应用前景将更为广阔.

- [1] Abe R 1959 *Prog. Theo. Phys.* **22** 213
- [2] Rogers F J, Dewart H E 1973 *Phys. Rev. A* **18** 1061
- [3] Meng X J, Sun Y S 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 345 (in Chinese)
[孟续军、孙永盛 1994 物理学报 **43** 345]
- [4] Meng X J, Zong X P, Bai Y, Sun Y S, Zhang J L 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2133 (in Chinese) [孟续军、宗晓萍、白云、孙永盛、张景琳 2000 物理学报 **49** 2133]
- [5] Jia H X, Meng X J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 70 (in Chinese) [贾洪祥、孟续军 2005 物理学报 **54** 70]
- [6] Tian C L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** (in press) (in Chinese) [田春玲 2007 物理学报 **56**(7) (出版中)]
- [7] Zhang Y, Chen Q F, Gu Y J, Cai L C, Lu T C 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1318 (in press) (in Chinese) [张颖、陈其峰、顾云军、蔡灵仓、卢铁城 2007 物理学报 **56** 1318]
- [8] Зельдович Я. В., Райзер Ю. П 1966 Изд. " Наука " (in Russian) [Я. В. 泽尔多维奇、Ю. П. 莱布撒尔 1980 激波和高温流体动力学现象物理学]
- [9] Wang C X, Tian Y M, Jiang M, Cheng X L, Yang X D, Meng C M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5784 (in Chinese) [王彩霞、田杨萌、姜明、程新路、杨向东、孟川民 2006 物理学报 **55** 5784]
- [10] More R M 1981 *Atomic Physics in Inertial Confinement Fusion* UCRL-84991
- [11] McChesney M 1964 *Can. J. Phys.* **42** 2473
- [12] Nellis W J, Holmes N C, Mitchell A C, Trainor R J, Governo G K, Ross M, Young D A 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 1248
- [13] Wang F H, Chen J P, Meng X J, Zhou X M, Li X J, Sun Y S, Jing F Q 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1308 (in Chinese) [王藩侯、陈敬平、孟续军、周显明、李西军、孙永盛、经福谦 2001 物理学报 **50** 1308]
- [14] Hong Y J, Dou Z G, Li J M, Yao H L, Luo J 2001 *J. Ins. Com. Tech.* **12** 99 (in Chinese) [洪延姬、窦建国、李俊美、姚洪林、罗靖 2001 指挥技术学院学报 **12** 99]
- [15] Wang F H, Jing F Q 2001 *J. At. Mol. Phys.* **18** 285 (in Chinese) [王藩侯、经福谦 2001 原子与分子物理学报 **18** 285]
- [16] Xu X S, Zhang W X 1986 *An Introduction to Practical Theory of Equation-of-State* (Beijing : Science Press) p138 (in Chinese) [徐锡申、张万箱 1986 实用物态方程理论导引 (北京 : 科学出版社) 第 138 页]
- [17] Rogers F J 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1531
- [18] Li Y K, Chen D Q, Li M S, Dong H 2001 *Chin. J. High Press. Phys.* **15** 271 (in Chinese) [李有宽、陈栋泉、李茂生、董航 2001 高压物理学报 **15** 271]
- [19] Jing M H, Meng X J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 587 (in Chinese) [姜昊、孟续军 2005 物理学报 **54** 587]

State equation of inert plasma^{*}

Tian Yang-Meng^{1)†} Wang Cai-Xia¹⁾ Jiang Ming²⁾ Cheng Xin-Lu³⁾ Yang Xiang-Dong³⁾

1) *Beijing Information Technology Institute, Beijing 100101, China*

2) *Department of Physics, Southwest University for Nationalities, Chengdu 610064, China*

3) *Atomic and Molecular Physics at Sichuan University, Chengdu 610065, China*

(Received 9 January 2007 ; revised manuscript received 11 February 2007)

Abstract

The paper present a simplified new model for computing state equation and ionization degree of inert plasma, which is based on the Thomas-Fermi (TF) statistical model. We fitted the numerical results of the ionization potential calculated by TF statistical model and obtained the analytic function for computing the ionization potential. Then in the local thermal equilibrium (LTE) case we assume the density of plasma $n(Z^*)$ is a continuous function of Z^* , and based on Saha equation with Debye-Hückel correction we established a simplified model of state equation of inert plasma. Using this simplified model we calculated the average degree of ionization and the state equation for Helium, Neon and Argon Plasma. The results from this simplified model are basically in agreement with both theory and experimental data. This simplified model can be used to calculate the state equation of plasma mixtures and is expected to have a wider application in the field of strongly ionized plasma.

Keywords : plasma, equation of state, ionization potential, degree of ionization

PACC : 3120, 3120L, 5225K

^{*} Project supported by National High Technology Research and Development Program of China (Grant No.2002AA831083) and the Science and Technology Development Program of the Education Commission of Beijing, China (Grant No. KM200510772005).

[†] E-mail : ymtian@biti.edu.cn