

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛОТНОГО ИОНИЗОВАННОГО ВЕЩЕСТВА

**П.А. Лобода^{1,2}, А.А. Овечкин¹, А.Л. Фальков^{1,2}, А.С. Королёв¹,
А.А. Шадрин¹, В.В. Попова¹, М.Е. Березовская¹**

¹Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский Научно-Исследовательский Институт Технической Физики им. акад. Е.И. Забабахина (РФЯЦ-ВНИИТФ), г. Снежинск, Россия

²Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, г. Москва, Россия

MODELING OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF DENSE IONIZED MATTER

**P.A. Loboda^{1,2}, A.A. Ovechkin¹, A.L. Falkov^{1,2}, A.S. Korolev¹,
A.A. Shadrin¹, V.V. Popova¹, and M.E. Berezovskaya¹**

¹Russian Federal Nuclear Center — E.I. Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russia

²National Research Nuclear University MEPhI, Moscow, Russia

План доклада

- Введение: теплофизические характеристики
 - Модели плотного ионизованного вещества, развиваемые в РФЯЦ-ВНИИТФ
 - Модель ионизационного равновесия плотной плазмы многоэлектронных ионов CP-SC
 - Модели «среднего атома в желе»
 - Модель RESEOS
 - Модели TFSC, TFIS и QMIS
 - Некоторые результаты расчётов
 - термодинамических
 - оптических
 - диэлектрических
 - транспортных
 - структурных
- характеристик плотного ионизованного вещества и
- тормозных потерь быстрых ионов
- Дальнейшее развитие моделей



Введение: теплофизические характеристики

Исследования по физике высоких плотностей энергии и астрофизике, изучение строения недр планет, разработка источников рентгеновского излучения высокой яркости, ...



Надежные систематические данные по термодинамическим, оптическим, диэлектрическим, транспортным и структурным свойствам плотного ионизованного вещества, тормозным потерям быстрых ионов



развитие теоретических методов реалистического представления плотного ионизованного вещества в широкой области плотностей и температур, а также согласованного описания его теплофизических свойств



РФЯЦ-ВНИИТФ: модель ионизационного равновесия неидеальной плазмы, современные модели среднего иона с различными способами учёта межйонных корреляций с полностью квантовомеханическим и квазиклассическим описанием свойств электронной компоненты

Модели плотного ионизованного вещества, развиваемые в РФЯЦ-ВНИИТФ

Модель ионизационного равновесия плотной плазмы многоэлектронных ионов CP-SC*) на основе «химического» представления для расчёта уравнений состояния (УРС) и оптических характеристик (коэффициенты поглощения, излучательная способность, пробеги излучения):

- выражение для свободной энергии Гельмгольца с учётом вырождения электронов;
- поправки на кулоновское взаимодействие и исключённый объём ионов;
- описание вклада связанных электронов на основе суперконфигурационного подхода с учётом возмущения спектра связанных состояний ионов плазменным микрополем с использованием формализма вероятностей заселения ⇒
зависимость статсумм суперконфигураций и ионов от плотности и температуры.

*) P.A. Loboda, V.V. Popova, A.A. Shadrin. Contrib. Plasma Phys., **49**, 738 (2009);

P.A. Loboda, D.S. Netsvetayev, V.V. Popova, L.B. Samolovskikh. J. Phys. A: Math. Gen., **39**, 4781 (2006).

П.А. Лобода, А.А. Овечкин, А.А. Шадрин. Труды Международной конференции «XIII Харитоновские научные чтения», 14-18 марта 2011 г., Саров, с. 297.

Модели плотного ионизованного вещества ...

Модели «среднего атома в желе»

RESEOS:

модели среднего атома Либермана* и нейтральной ионной сферы^{†, ‡}.

$$\nabla^2 V_{el}(r) = 4\pi (n_e(r) - \langle Z \rangle n_i(r) - Z\delta(\vec{r}))$$

$$n_i(r) = n_i^0 \theta(r - r_0), \quad r_0 = \left(\frac{3}{4\pi n_i^0} \right)^{1/3}, \quad n_i^0 = \frac{\rho N_A}{A}, \quad \langle Z \rangle = \frac{n_e^0 \equiv \lim_{r \rightarrow \infty} n_e(r)}{n_i^0}$$

TFSC, TFIS, QMIS: модели среднего атома на основе модели Старретта и Саумона[¶] с учётом ионных корреляций с квазиклассическим (TFSC, TFIS) и квантовомеханическим (QMIS) описанием электронов.

$$n_i(r) = n_i^0 g(r)$$

$$n_i(r) = n_i^{(1 \text{ итер.})}(r)$$

$g(r)$ — из решения уравнений Орнштейна-Цернике

(TFSC)

$g(r)$ — 1-я итерация решения уравнений Орнштейна-Цернике (TFIS, QMIS)



* D.A. Liberman. PRB **20**, 4981 – 4989 (1979)

† R. Piron, T. Blenski. HEDP **7**, 346 – 352 (2011)

‡ R. Piron, T. Blenski. PRE **83**, 026403 (2011)

¶ C. E. Starrett, D. Saumon. PRE **87**, 013104 (2013)

Модели плотного ионизованного вещества ...

Модели «среднего атома в желе»

RESEOS

Модель Либермана ионной сферы

Модель нейтральной

Условие нейтральности

$$4\pi \int_0^{r_0} n_e(r) r^2 dr = Z \Rightarrow \text{химический потенциал } \mu_e$$

$$4\pi \int_0^{\infty} (n_e(r) - \langle Z \rangle n_i(r)) r^2 dr = Z$$

Электронный потенциал

$$V(r) = V_{el}(r) + V_{xc}(n_e(r)) + v(n_e(r_0), n_e^0)$$

$$v \neq 0 \text{ if } n_e(r_0) \neq n_e^0$$

$$V(r) = V_{el}(r) + V_{xc}(n_e(r))$$

$$-i(c\nabla)\Psi(\vec{r}) = (\varepsilon + V(r) - c^2(\beta - 1))\Psi(\vec{r}) \quad (\text{уравнение Дирака})$$

Электронная плотность

$$n_e(r) \equiv n_e^0 \quad @ \quad r > r_0$$

$$n_e(r) \rightarrow n_e^0 \quad @ \quad r \rightarrow \infty$$



Модель RESEOS

Модель RESEOS*) даёт возможность

- получать гладкие зависимости термодинамических и оптических характеристик от температуры и плотности в широком интервале плотностей и температур (корректное описание процесса ионизации давлением через учёт резонансов эл. плотности);
- получать термодинамически согласованные значения электронных компонент давления и внутренней энергии путём интегрирования энтропии электронов по температуре;
- существенно упростить расчёт сложных спектров связанно-связанного поглощения / излучения с помощью предложенного обобщённого варианта суперконфигурационного подхода.

Модель RESEOS реализована в одноимённом высокопроизводительном пакете программ, который позволяет проводить систематические расчёты

- термодинамических (средняя степень ионизации, ионный состав, уравнения состояния),
- оптических (коэффициенты поглощения, излучательная способность, пробеги излучения)
- транспортных (коэффициенты электропроводности и теплопроводности, термо-ЭДС) и
- диэлектрических (комплексные диэлектрическая проницаемость, коэффициент преломления, коэффициент поглощения с учётом рефракции)

характеристик плотного ионизованного вещества, а также тормозных потерь быстрых ионов в широком интервале плотностей и температур.



*) A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, V.G. Novikov, A.S.Grushin, A.D. Solomyannaya. HEDP **13**, 20–33 (2014)
A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov. HEDP **20**, 38–54 (2016)

Модели TFSC, TFIS, QMIS

Реализованы в программе «Элегия», которая позволяет проводить расчёты

- структурных (ионные парные корреляционные функции, ионный структурный фактор) и
- термодинамических (средняя степень ионизации, уравнения состояния) характеристик плотного ионизованного вещества, а также эффективных парных потенциалов ион-ионного взаимодействия  расчёты методом классической молекулярной динамики (псевдоатомной МД — PAMD)  ионная компонента УРС, транспортные характеристики (коэффициенты диффузии, вязкости).

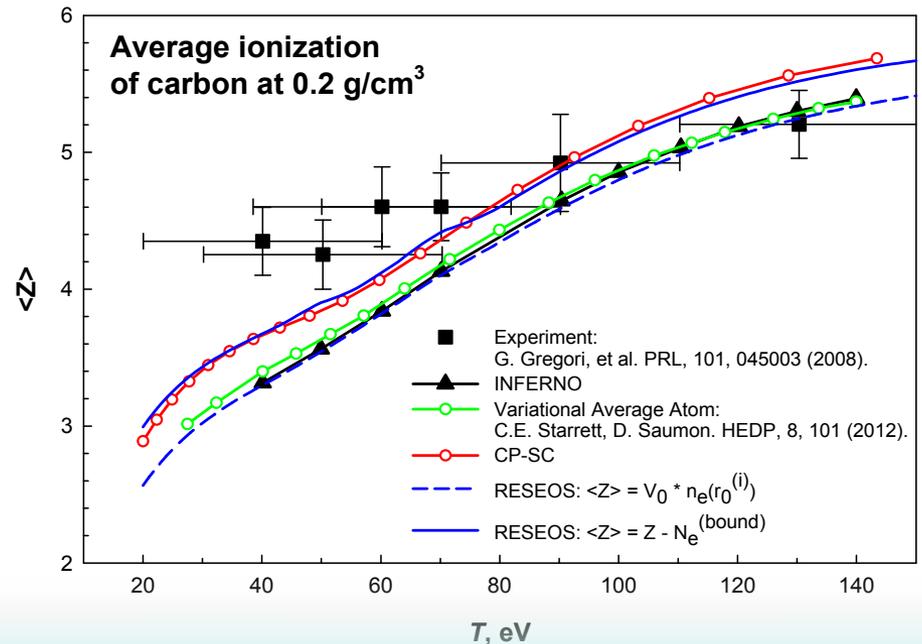
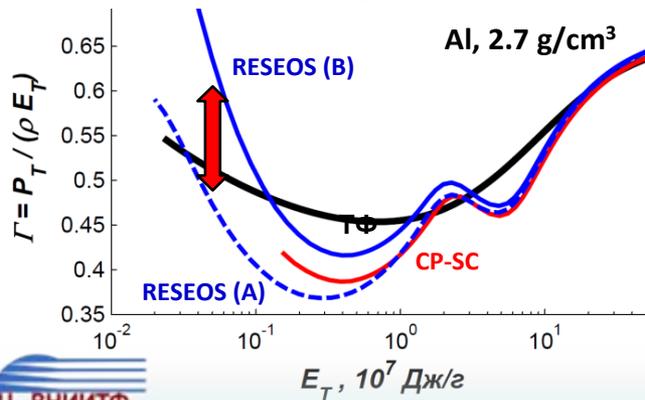
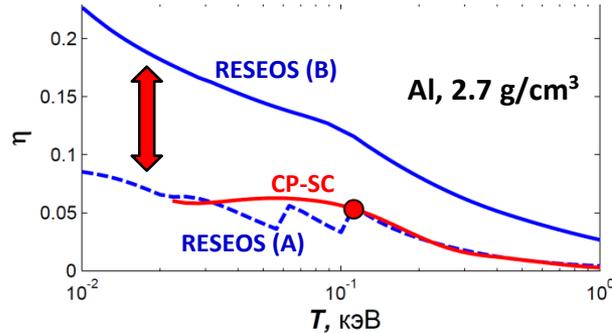
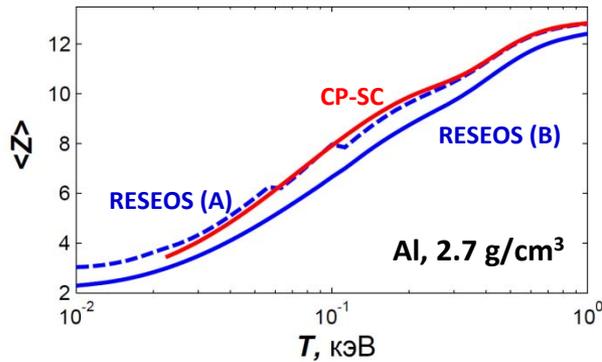
Некоторые результаты расчётов термодинамических характеристик

RESEOS

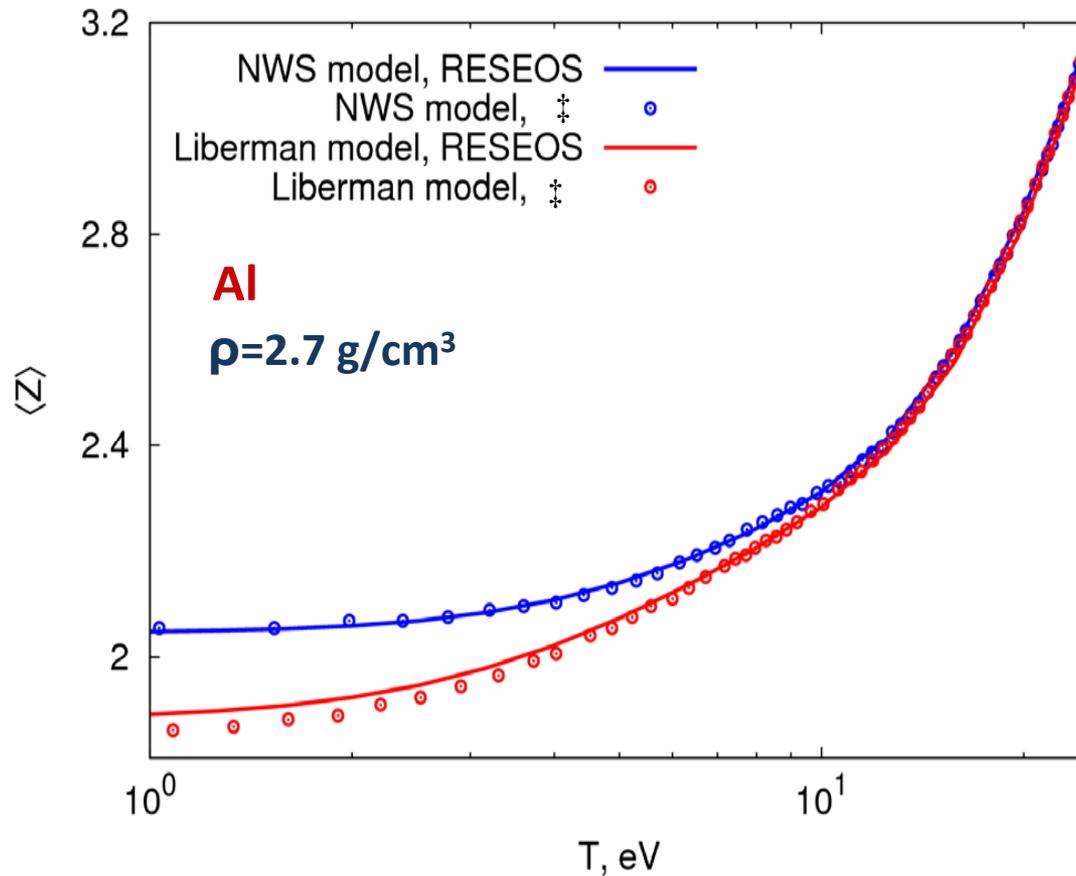
$$\langle Z \rangle(\rho, T) = \begin{cases} \text{(A)} & Z - N_e^{(bound)}, \quad N_e^{(bound)} = \sum_{nlj} N(\varepsilon_{nlj}) \int_0^{r_0} [F_{nlj}^2(r) + G_{nlj}^2(r)] dr, \\ \text{(B)} & V_0 \cdot n_e(r=r_0) \end{cases}$$

⇓

$$4\pi \int_0^{R_{ion}} \rho_e(r) r^2 dr = Z - \langle Z \rangle(\rho, T), \quad \eta(\rho, T) = \left(\frac{R_{ion}}{r_0} \right)^3, \quad r_0 = 1.388(A/\rho)^{1/3}$$



Некоторые результаты расчётов термодинамических характеристик

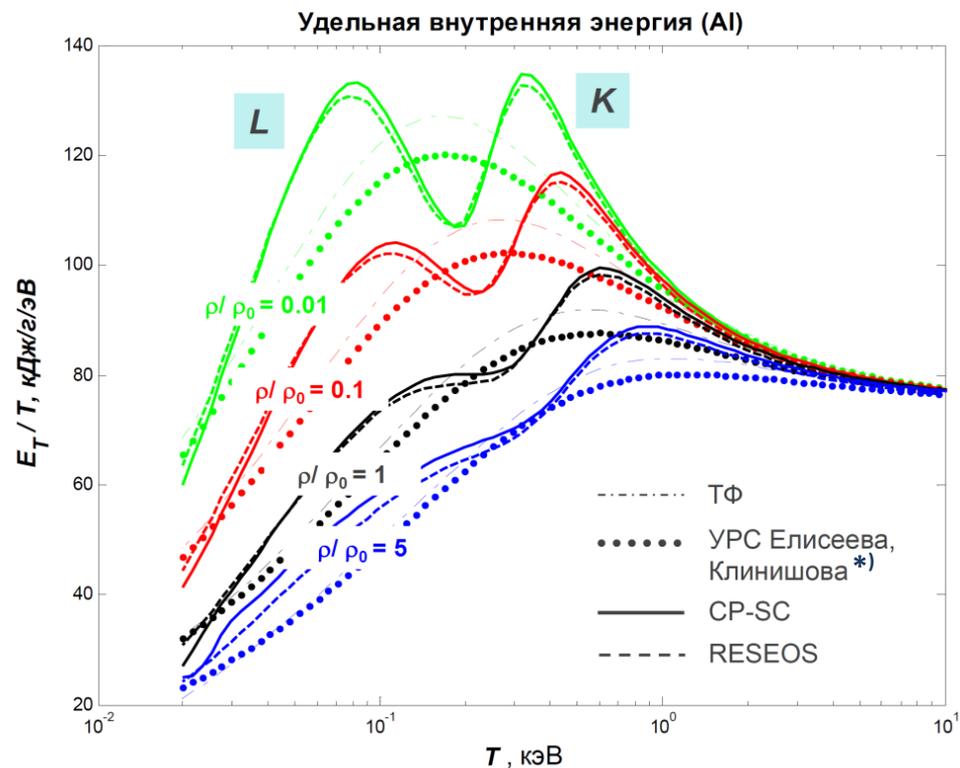
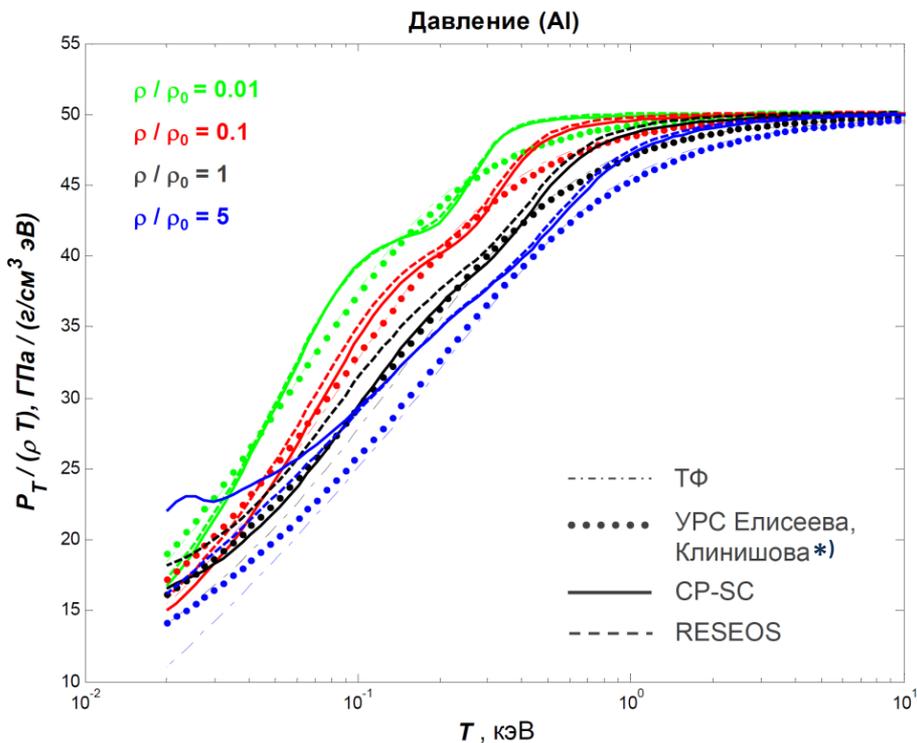


$$\mu_e^{(Lib)} \neq \mu_e^{(NWS)} \Rightarrow \langle Z \rangle^{(Lib)} \neq \langle Z \rangle^{(NWS)}$$



‡ R. Piron, T. Blenski. PRE **83**, 026403 (2011)

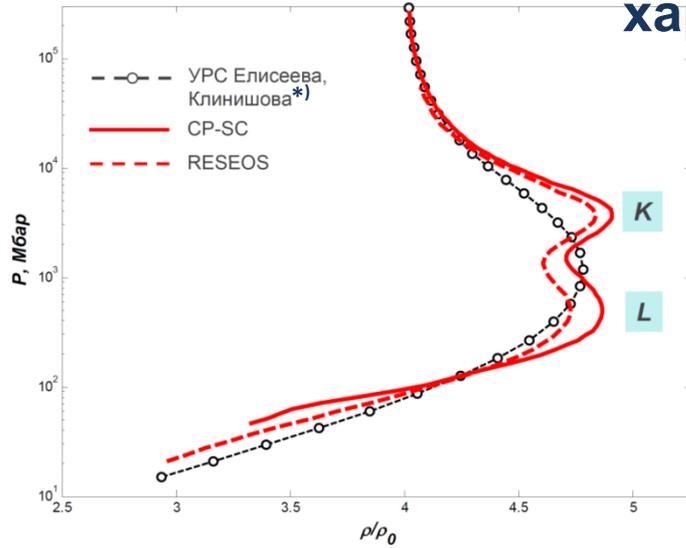
Некоторые результаты расчётов термодинамических характеристик



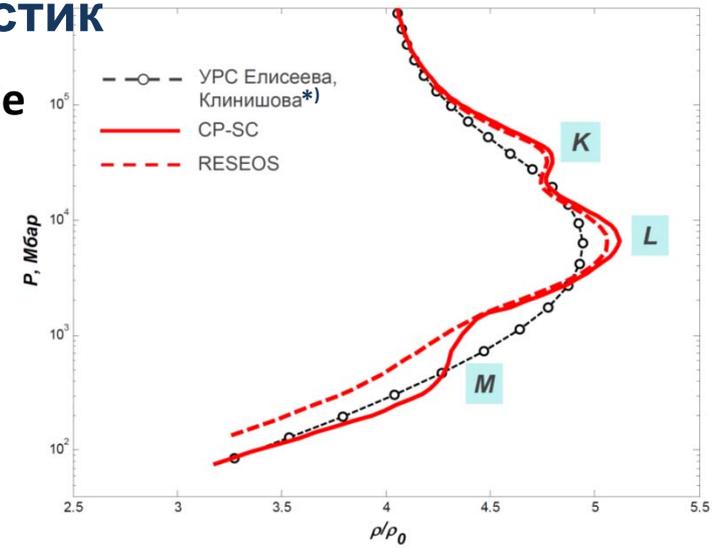
*) Г.М. Елисеев, Г.Е. Клинишов. Препринт ИГМ АН СССР, № 173 (1982)

Некоторые результаты расчётов термодинамических характеристик

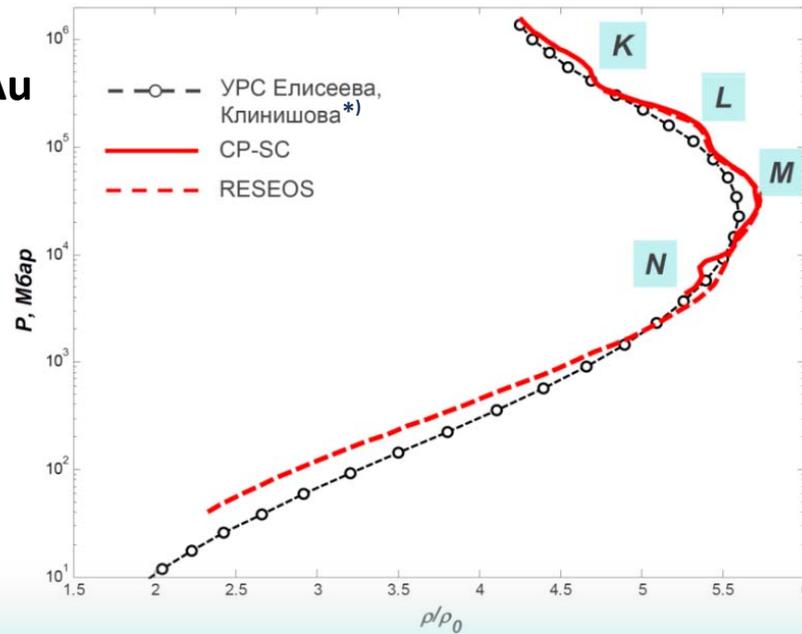
Al



Fe



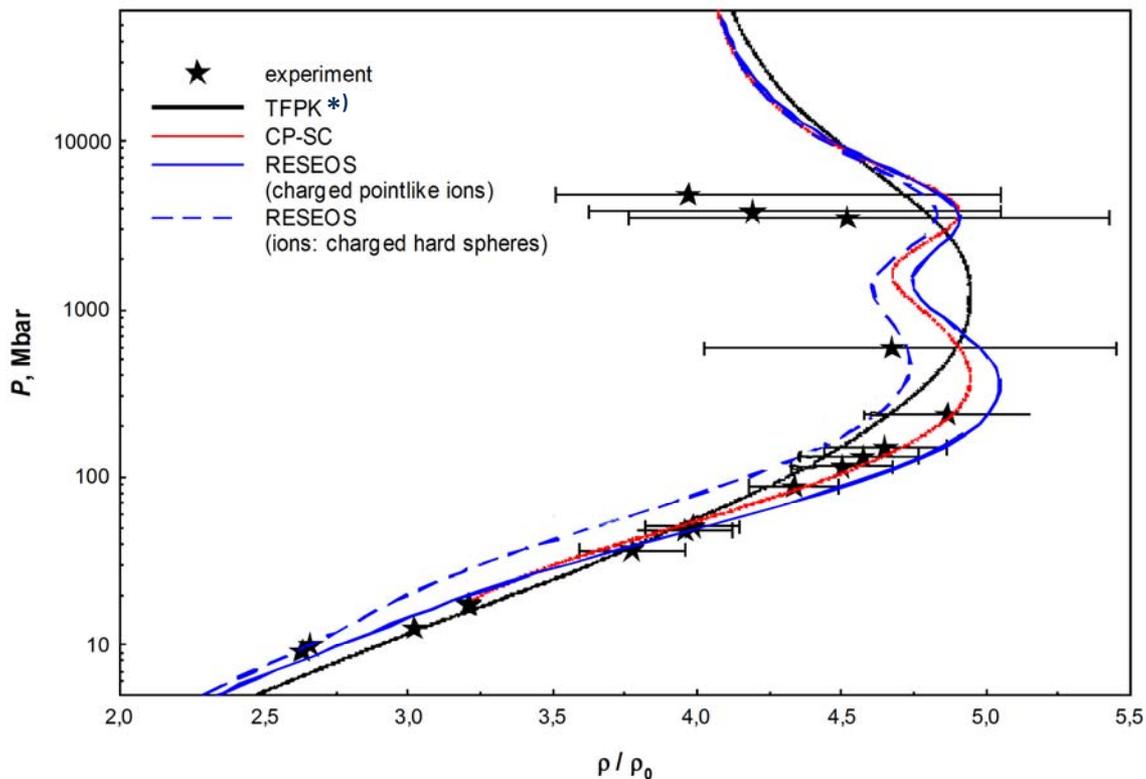
Au



*) Г.М. Елисеев, Г.Е. Клинишов. Препринт ИГМ АН СССР, № 173 (1982)

Некоторые результаты расчётов термодинамических характеристик

Ударная адиабата сплошного Al



Влияние собственных объёмов ионов $V_{\text{ion}} = f(\langle Z \rangle)$ определяет жёсткость УРС. $\langle Z \rangle$ - ненаблюдаемая величина

Экспериментальные данные:

А.С. Владимиров и др. Письма в ЖЭТФ **39**, 69 (1984)

В.А. Симоненко и др. ЖЭТФ **88**, 1452–1459 (1985)

Е.Н. Аврорин и др. Письма в ЖЭТФ **43**, 241 (1986)

Е.Н. Аврорин и др. ЖЭТФ **93**, 613–626 (1987)

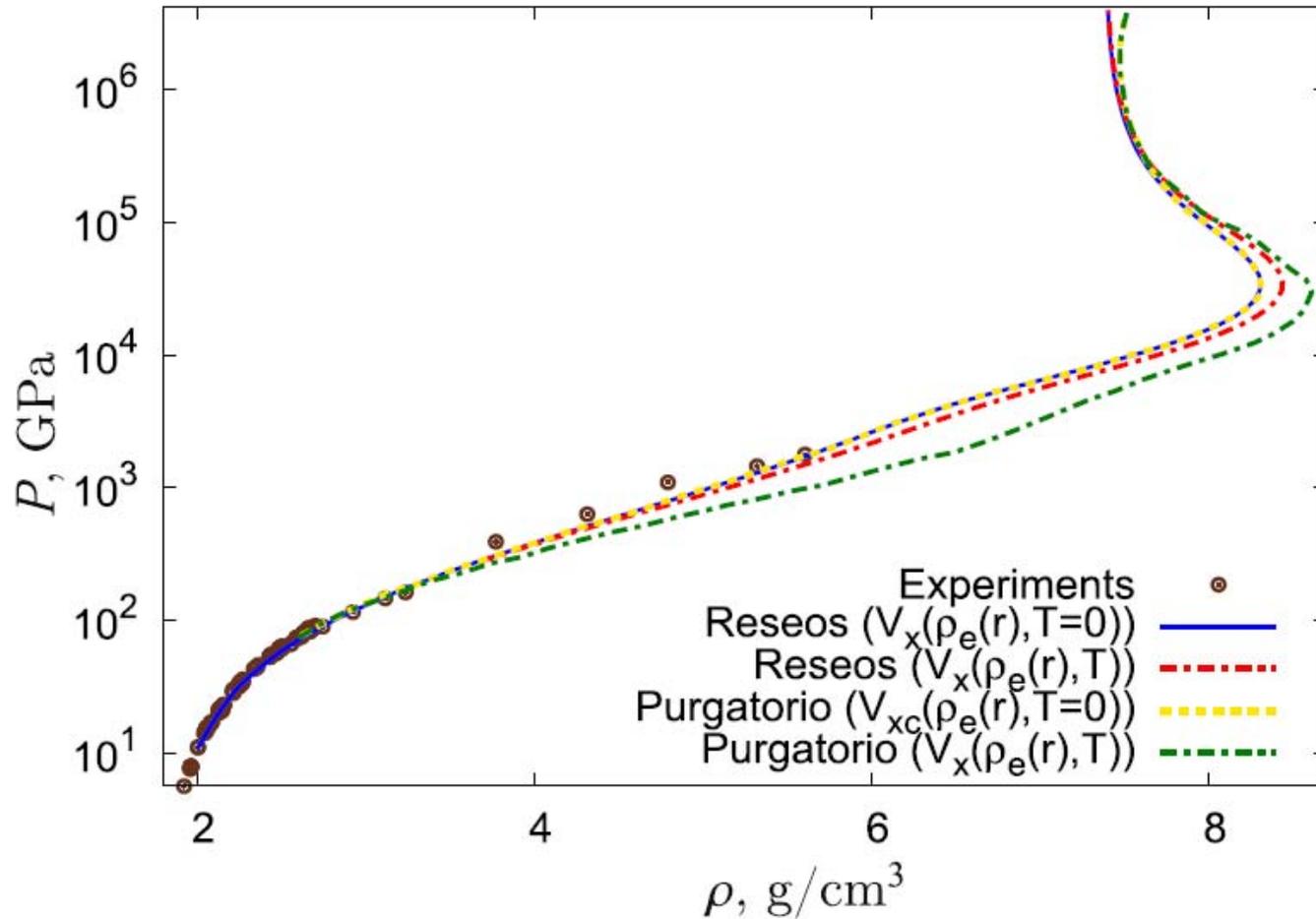
М.А. Подурец и др. ТВТ **32**, 952–955 (1994)

*) Н.Н. Калиткин, Л.В. Кузьмина. Препринт ИГМ АН СССР № 35 (1975)

В.П. Копышев. ЧММСС **8**, 54–67 (1977)

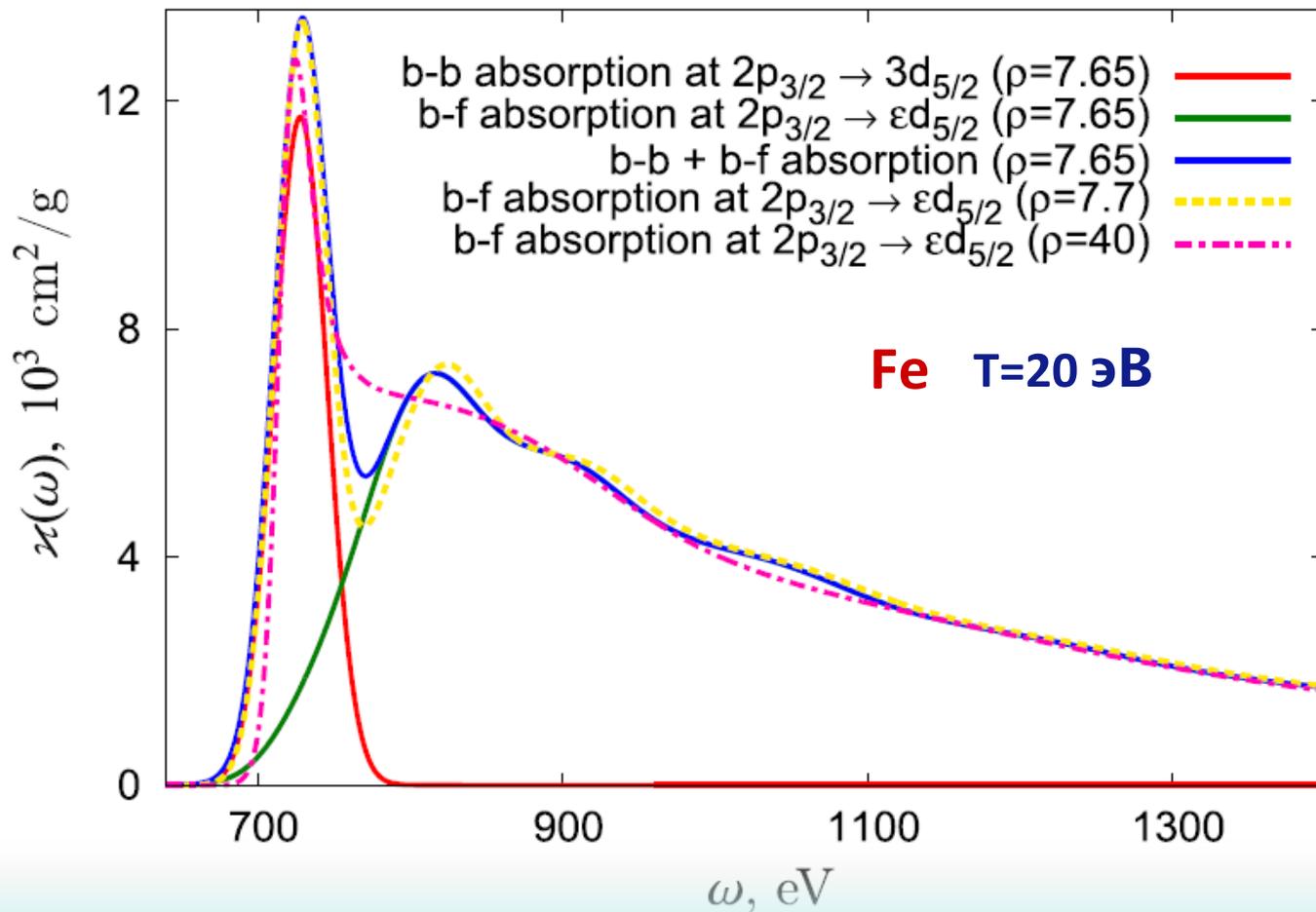


Ударная адиабата сплошного Ве



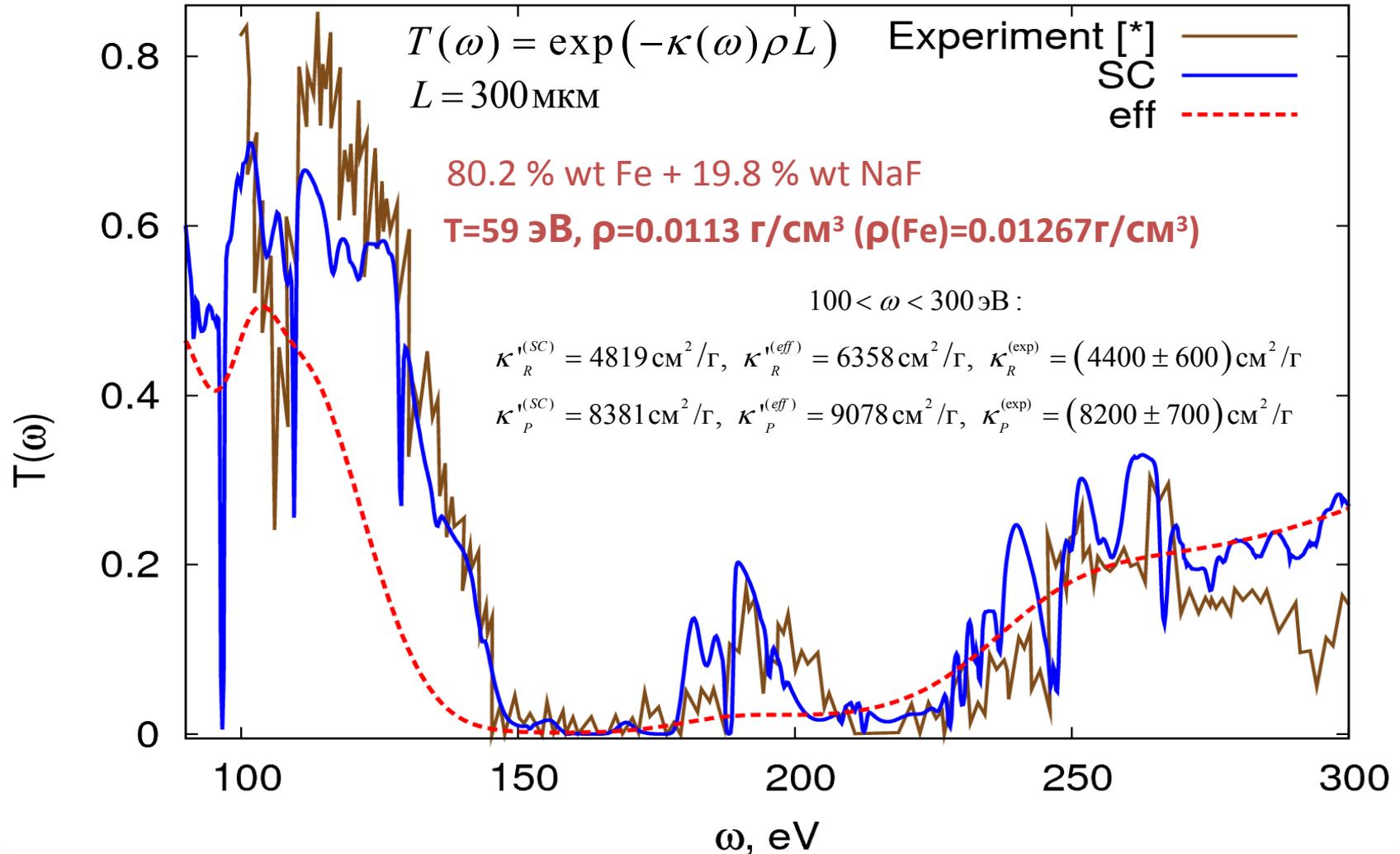
Некоторые результаты расчётов оптических характеристик

Спектральные коэффициенты поглощения плавно изменяются при ионизации давлением при условии, что сечения поглощения в линиях и фотоионизации вычисляются в одинаковом приближении (здесь — эффективный учёт флуктуаций чисел заполнения)



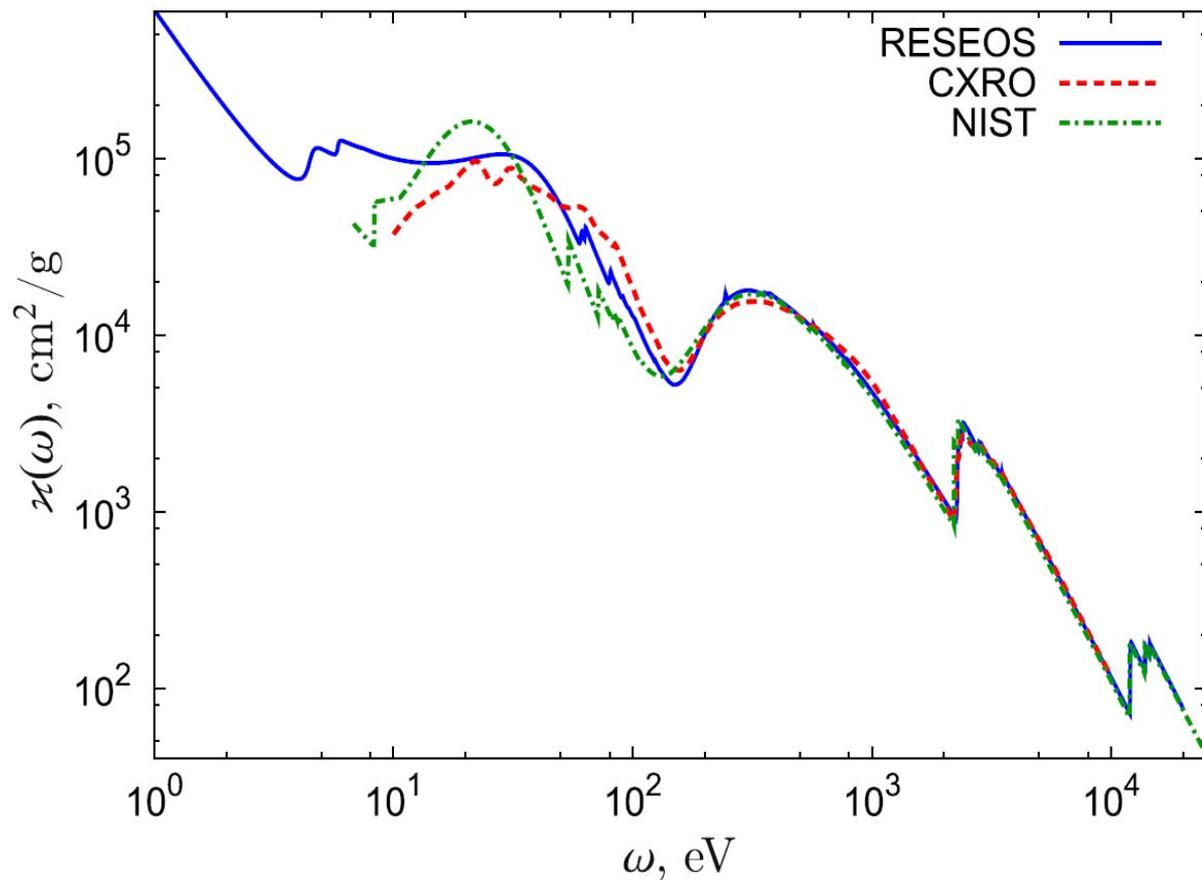
Некоторые результаты расчётов оптических характеристик

К-т пропускания в SC приближении и при эфф. учёте флуктуаций чисел заполнения



Некоторые результаты расчётов оптических характеристик

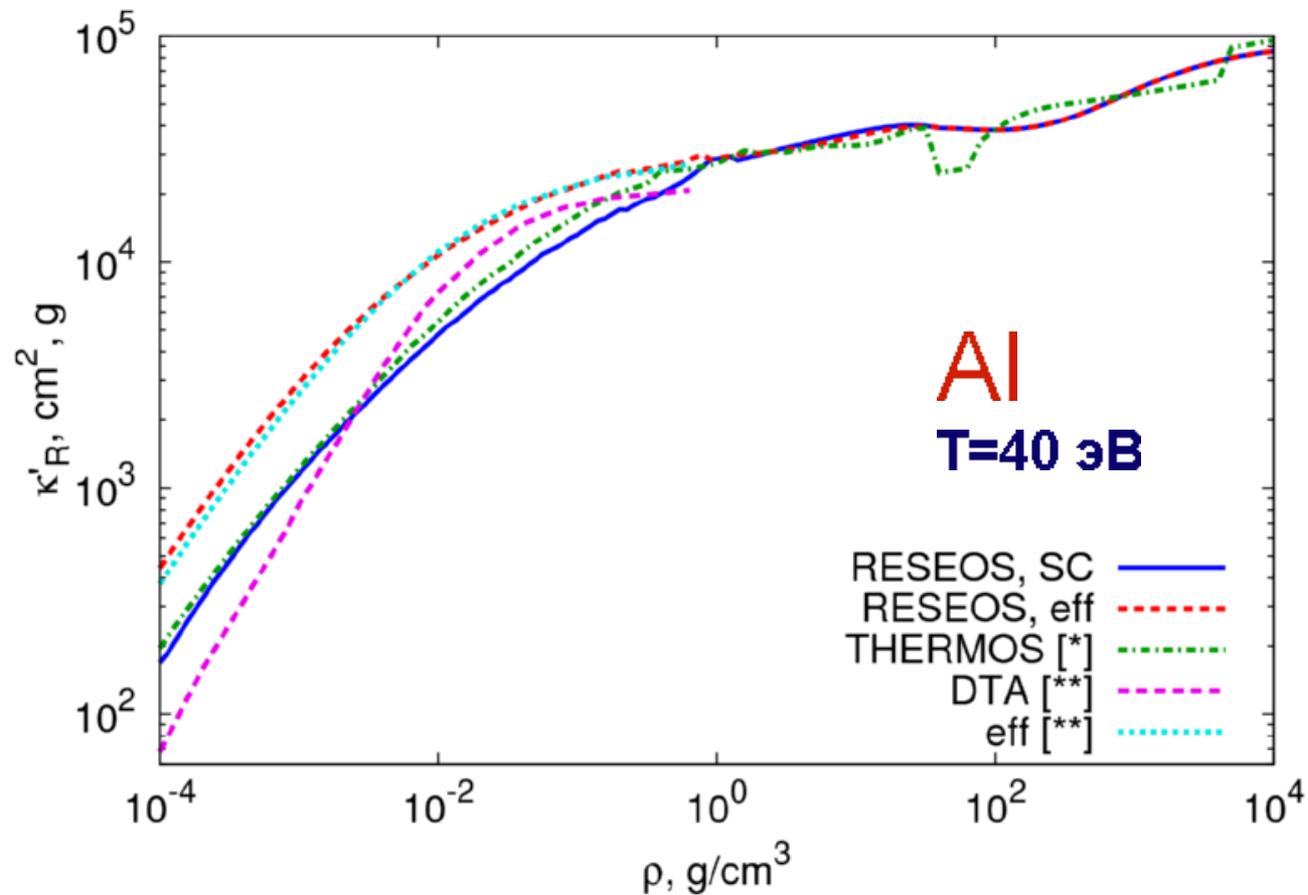
Непрозрачность Au @ $\rho = 19.3 \text{ г/см}^3$ & $T = 293 \text{ К}$.
Справочные данные CXRO & NIST для холодного Au



Центр рентгеновской оптики (CXRO),
<http://cxro.lbl.gov>

Нац. Ин-т стандартов и технологий США (NIST),
<http://physics.nist.gov/PhysRef/Data/FFast/html/form.html>

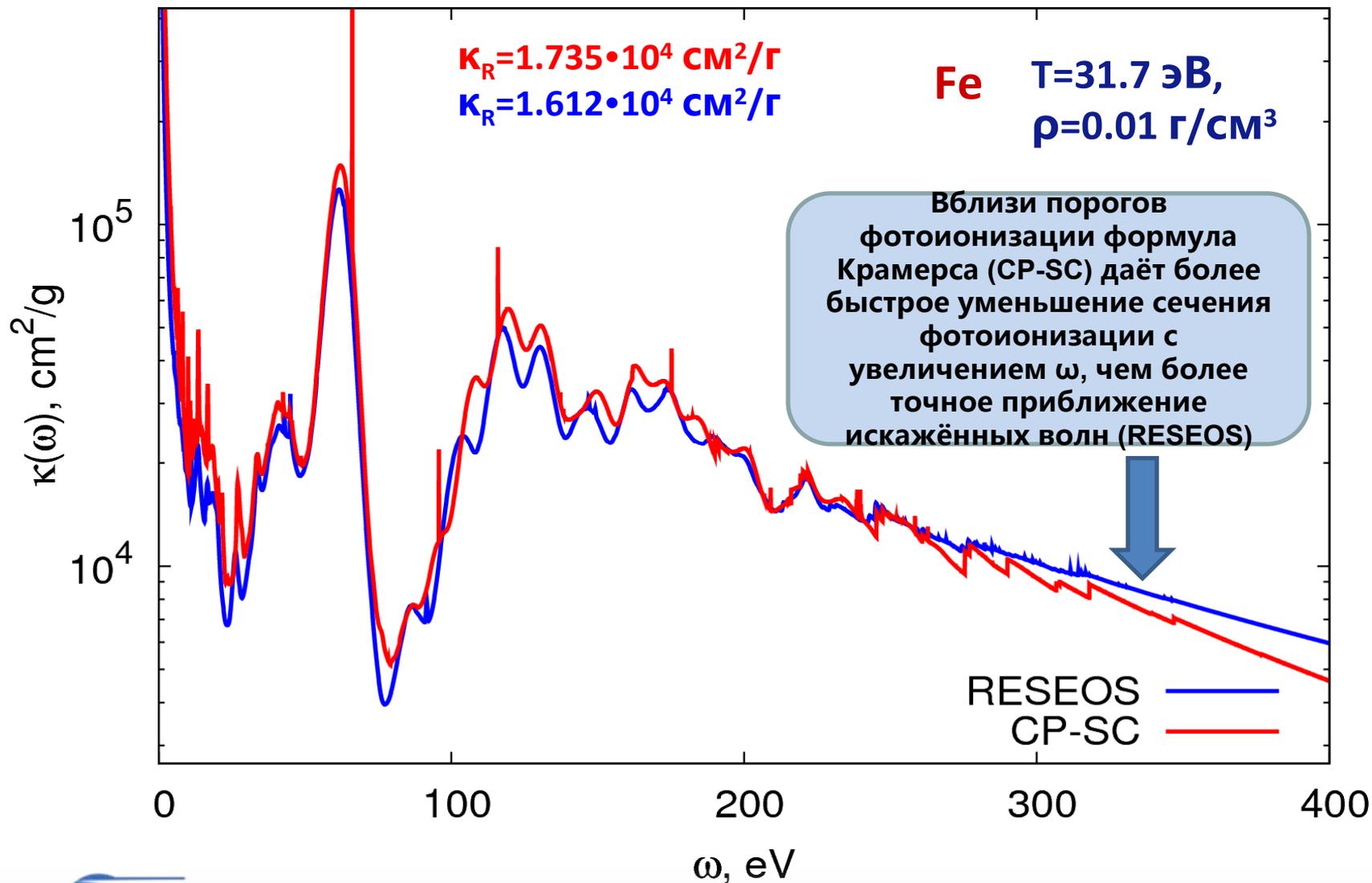
Некоторые результаты расчётов оптических характеристик



[*] A.F. Nikiforov, V.G. Novikov, V.B. Uvarov. *Quantum-statistical models of hot dense matter. Methods for computation opacity and equation of state*. Basel, Birkhäuser, 2005.

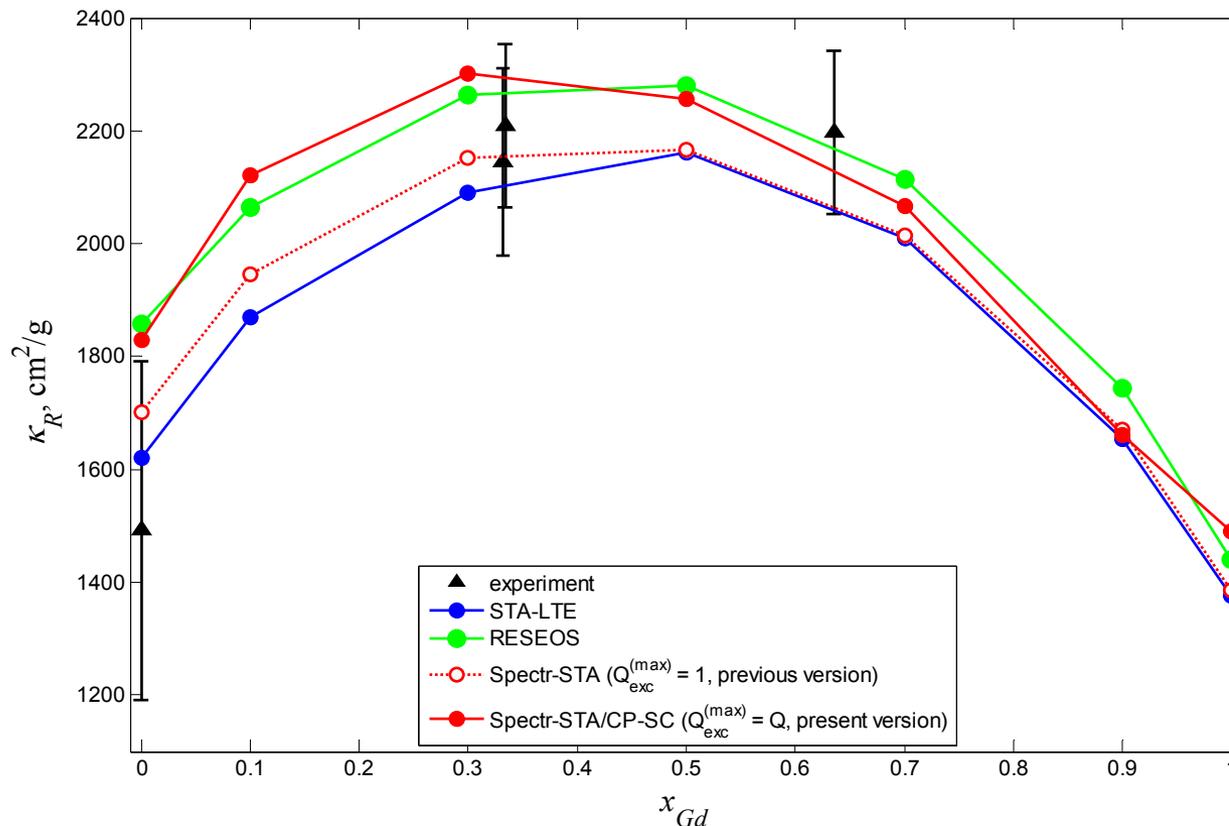
[**] J. Zeng, J. Yuan. *PRE* **66**, 016401 (2002)

Некоторые результаты расчётов оптических характеристик



Некоторые результаты расчётов оптических характеристик

Средняя по Росселанду непрозрачность смеси $\text{Au}_{1-x}\text{Gd}_x$ как функция доли Gd x_{Gd} при $T = 250$ эВ и $\rho = 1$ г/см³



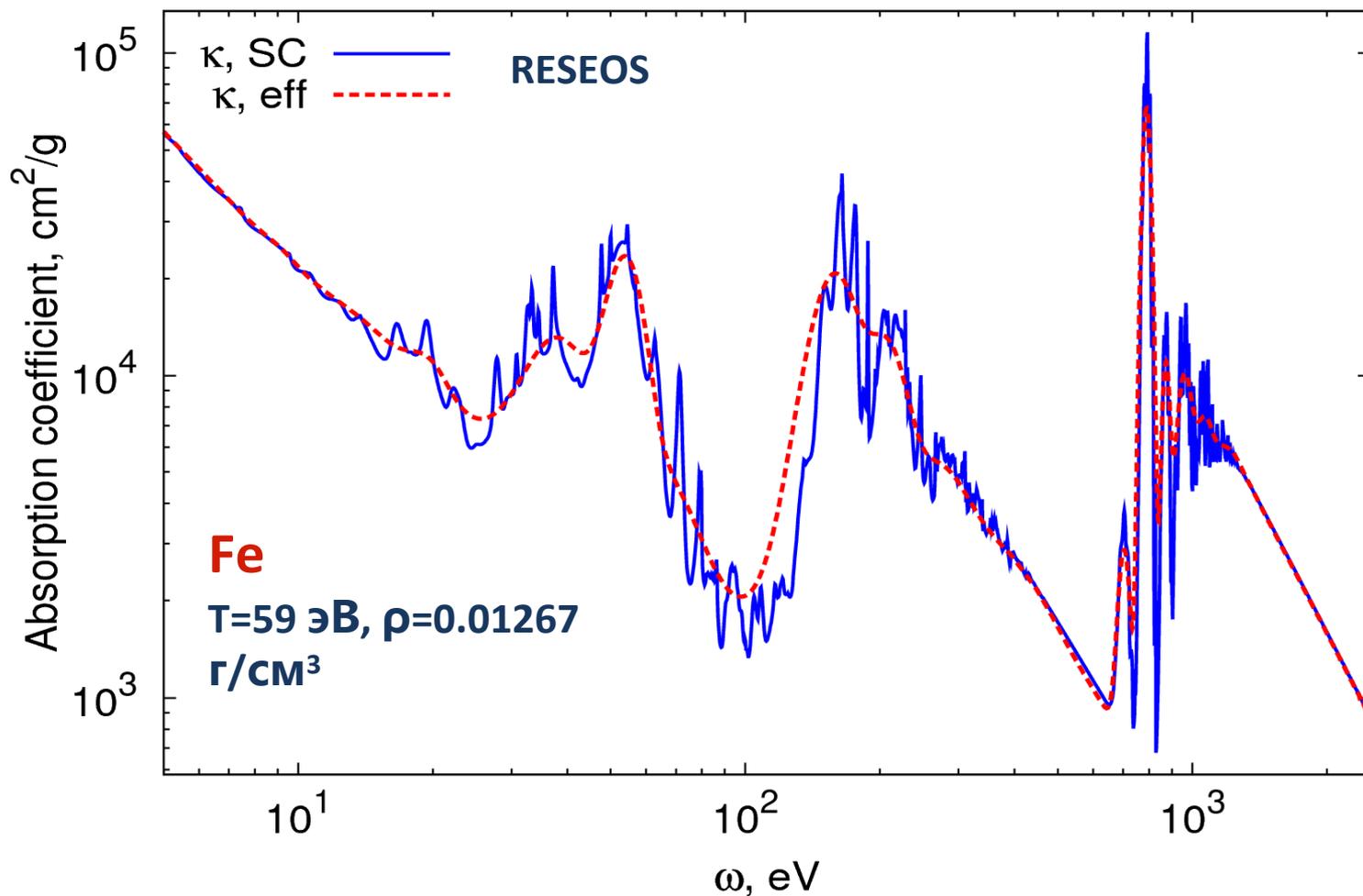
Experiment: T.J. Orzechowski, et al. PRL **77**, 3545 (1996).

STA-LTE: D. Colombant, M. Klapisch, A. Bar-Shalom. PRE, **57** 3411, 1998;
J. Oreg, A. Bar-Shalom, M. Klapisch. PRE **55**, 5874, 1997.

Spectr-STA: P.A. Loboda, D.S. Netsvetayev, V.V. Popova, L.B. Samolovskikh.
J. Phys. A: Math. Gen., **39**, 4781, 2006.



Некоторые результаты расчётов оптических характеристик



Некоторые результаты расчётов диэлектрических характеристик

$$k(\omega) = k'(\omega)/n_1(\omega), \quad n(\omega) = n_1(\omega) + in_2(\omega) \quad [*]$$



$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega) &= 1 + 4\pi i \sigma(\omega)/\omega, & k(\omega) &= 2\omega n_2(\omega)/c \\ \sigma(\omega) &= \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \sigma_1(\omega) &= ck'(\omega)/4\pi = ck(\omega)\rho/4\pi, \\ \kappa(\omega) &\text{ – непрозрачность @ } (\rho, T) \text{ [см}^2\text{/Г]} \end{aligned}$$

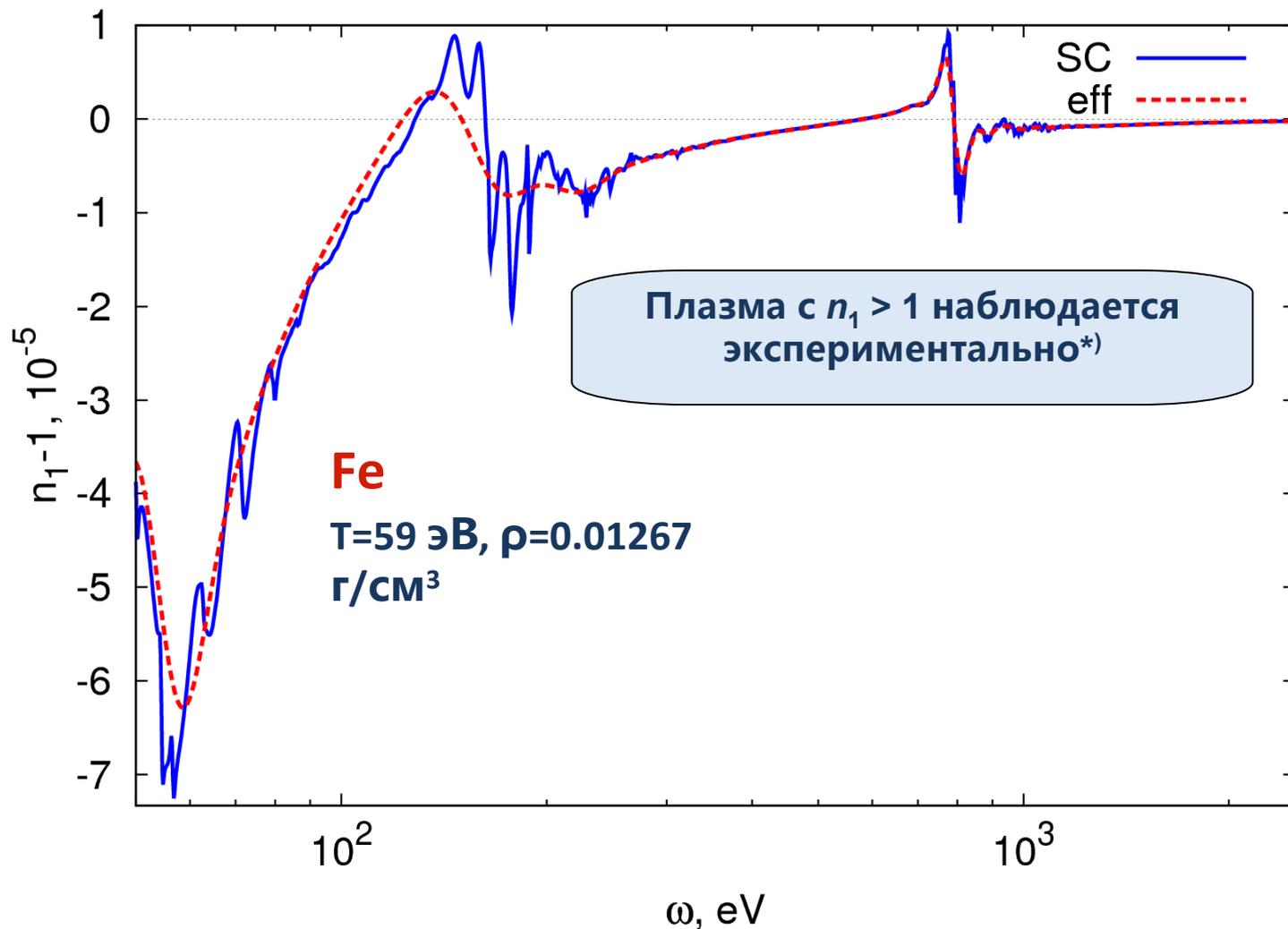


$$\sigma_2(\omega), \quad \varepsilon(\omega)$$



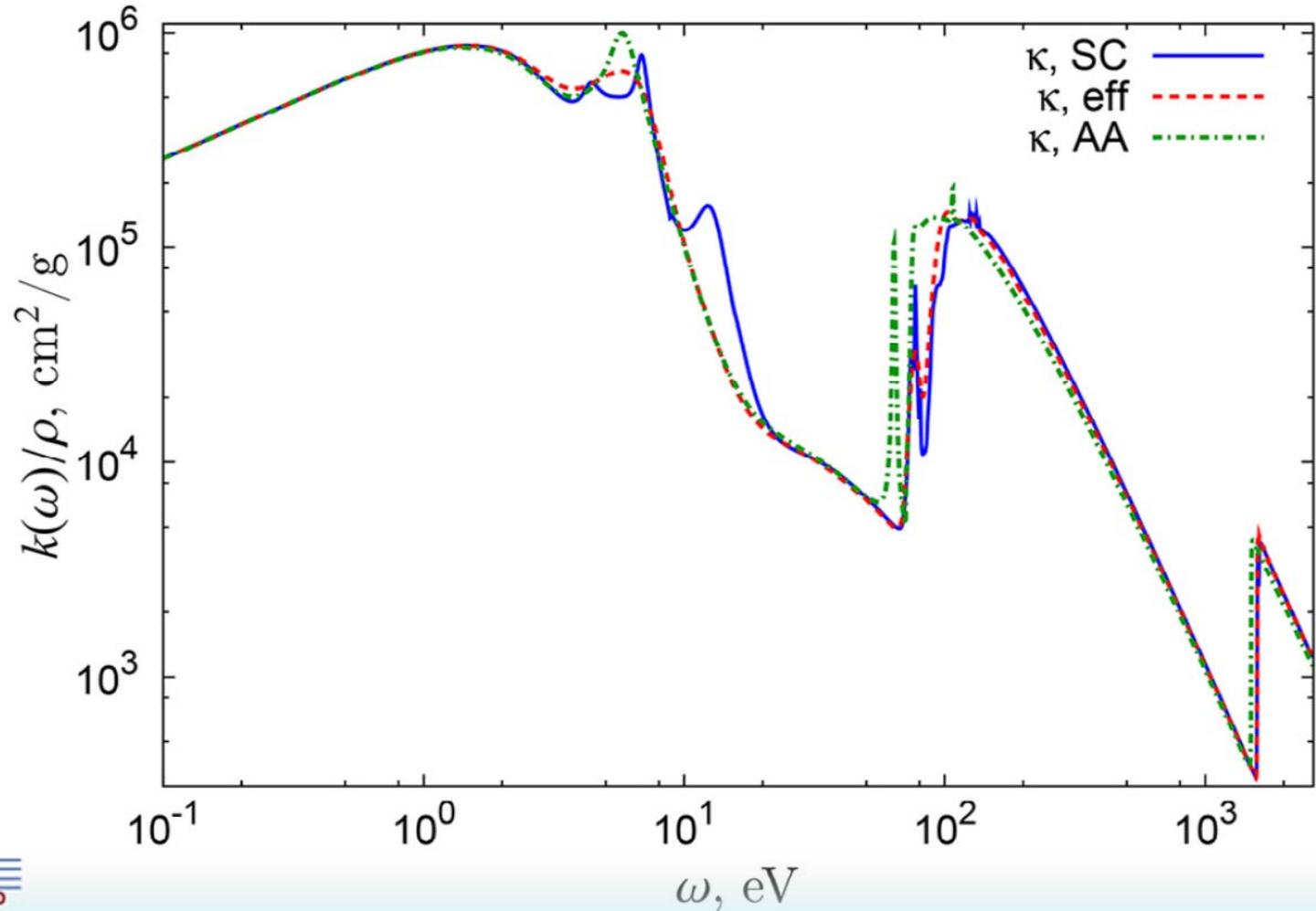
$$n(\omega)$$

Некоторые результаты расчётов диэлектрических характеристик



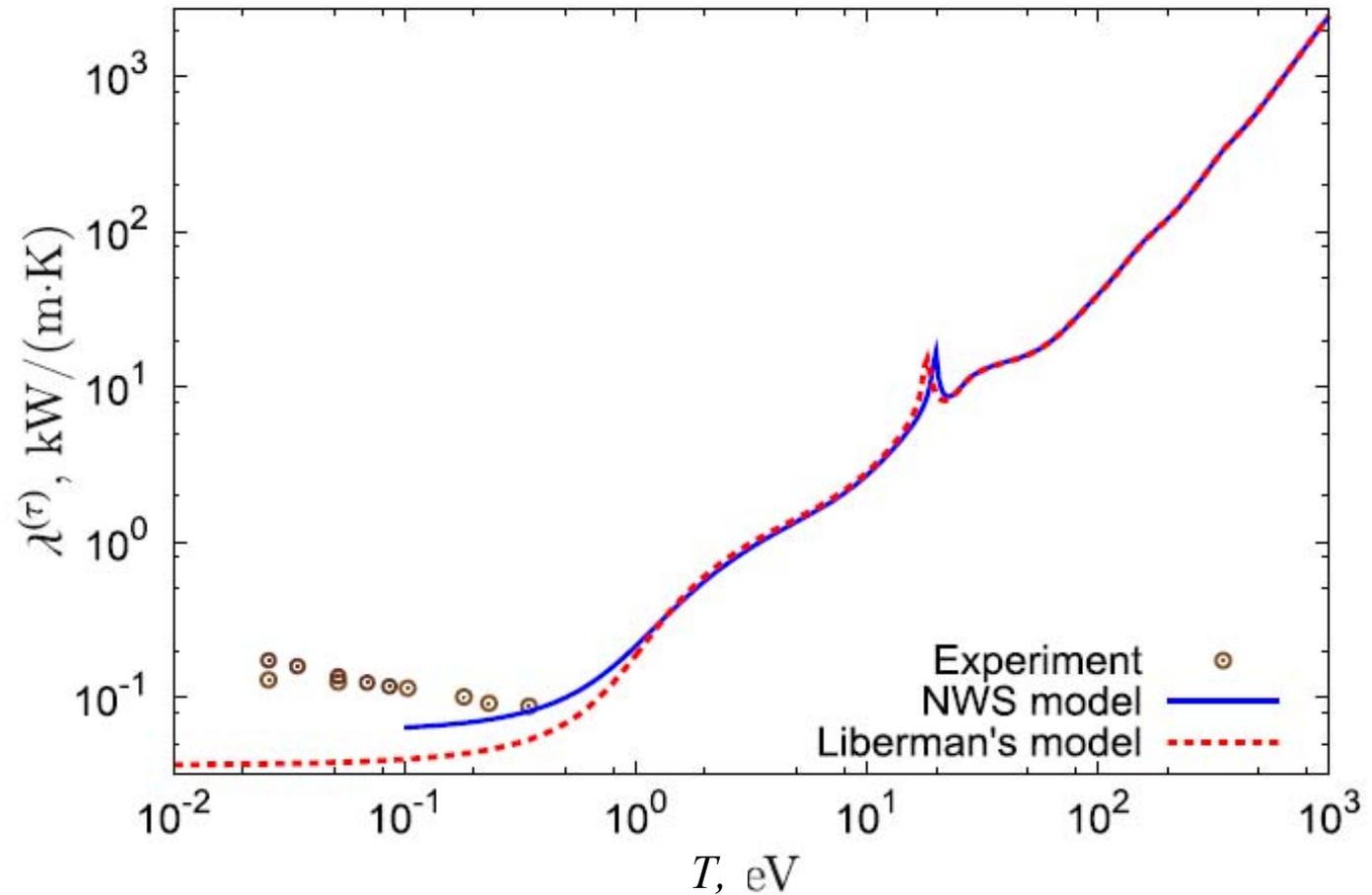
Некоторые результаты расчётов диэлектрических характеристик

Непрозрачность Al с учётом рефракции $k(\omega)/\rho$ @ $T = 5$ эВ & $\rho = 0.27$ г/см³



Некоторые результаты расчётов транспортных характеристик

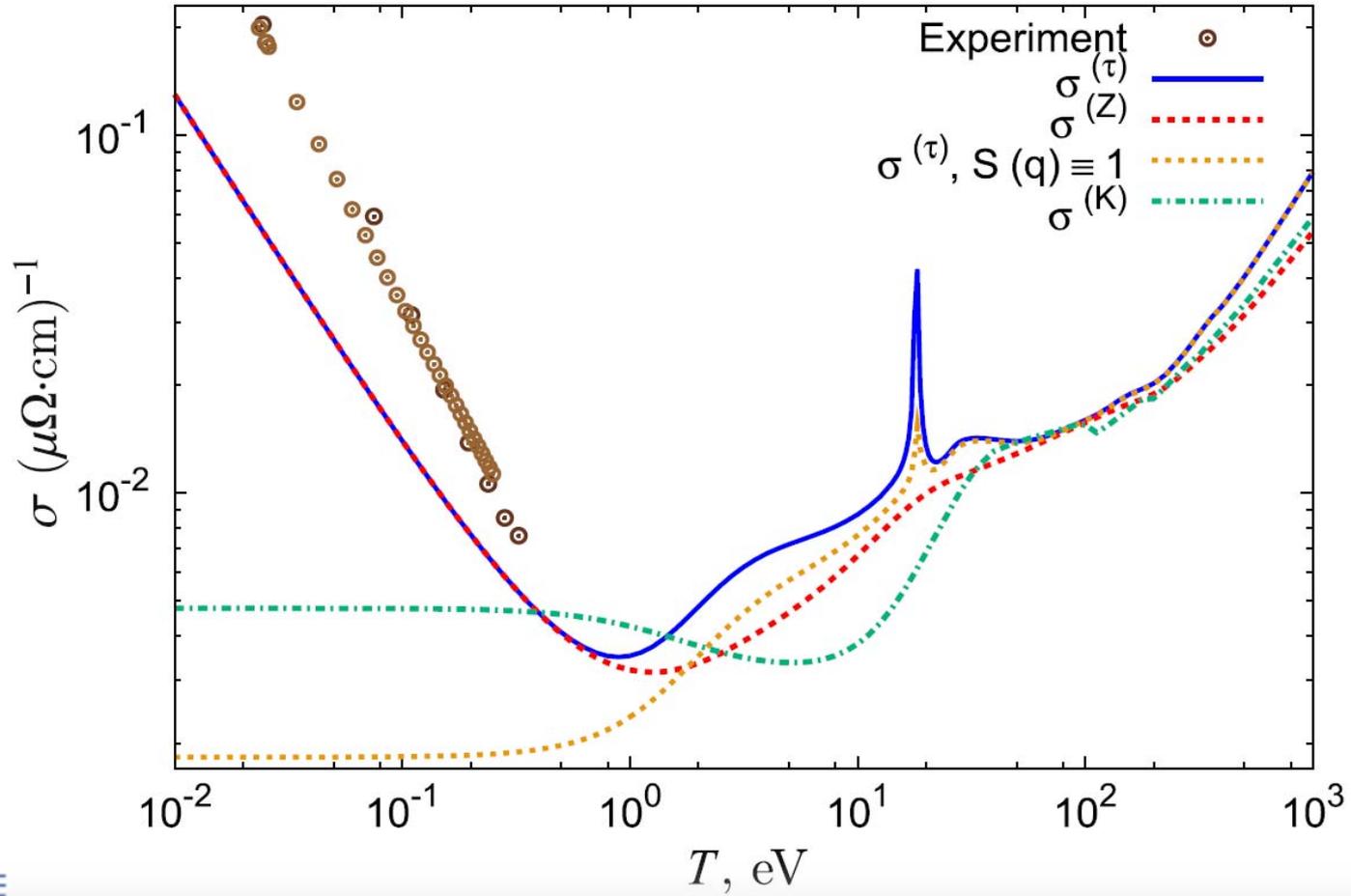
RESEOS: изохоры коэффициента электронной теплопроводности для W нормальной плотности ($\rho = 19.3 \text{ g/cm}^3$) в приближении времени релаксации



- ⦿ I.K. Kikoin (Ed.), *Tables of Physical Quantities, Handbook*, Atomizdat, Moscow (1976) [in Russian].
- I. Grigoryev, E. Meylikhov (Eds.), *Physical Quantities, Handbook*, Energoatomizdat, Moscow (1991) [in Russian].

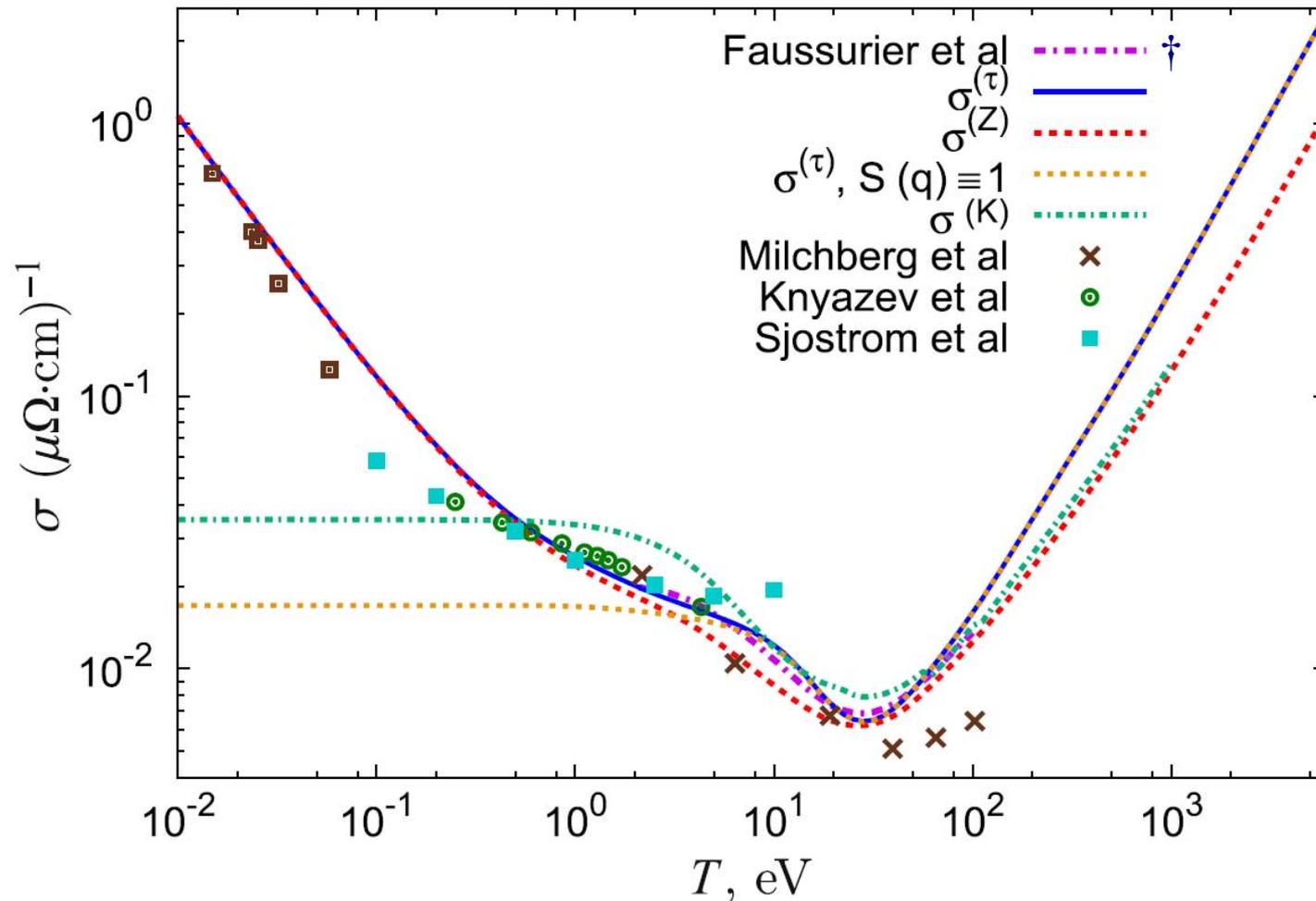
Некоторые результаты расчётов транспортных характеристик

Изохоры проводимости W @ $\rho = 19.3 \text{ г/см}^3$, рассчитанные по RESEOS (модель Либермана) в различных приближениях



Некоторые результаты расчётов транспортных характеристик

RESEOS: изохоры проводимости Al @ $\rho = 2.7 \text{ г/см}^3$ в различных приближениях (модель Либермана)



× H.M. Milchberg *et al.* PRL 61, 2364–2367(1988).

□ I.K. Kikoin (Ed.), *Tables of Physical Quantities, Handbook*, Atomizdat, Moscow (1976) [in Russian].

† G. Faussurier, C. Blancard, PRE 91, 113105 (2015); расчёт по формуле Займана с полным $S(q)$

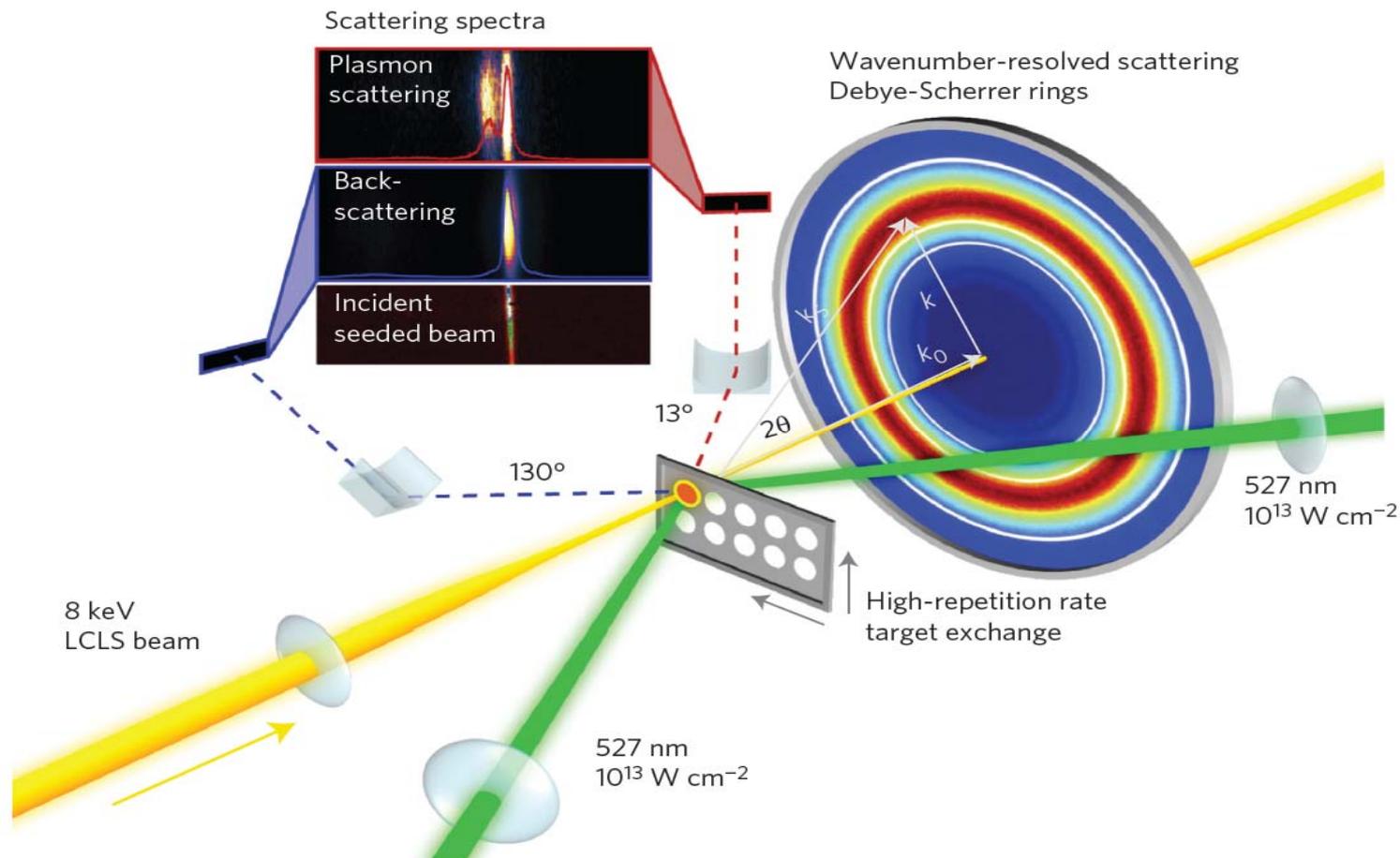
■ T. Sjostrom, J. Daligault. PRE 92, 063304 (2015)

○ D.V. Knyazev, P.R. Levashov. PoP 21, 073302 (2014)



Некоторые результаты расчётов структурных характеристик

Эксперимент LCLS MEC по определению статического структурного фактора в плотном тёплом Al методом упругого томсоновского рассеяния фотонов (XRTS)



Некоторые результаты расчётов структурных характеристик

Определение упругого статического структурного фактора в плотном тѐплом AI методом упругого томсоновского рассеяния фотонов (XRTS)

$$\begin{aligned} S_{tot}(\mathbf{k}, \omega) &= S_{el}(k) \delta(\omega) + S_{ne}(\mathbf{k}, \omega) + S_{ee}(\mathbf{k}, \omega) = \\ &= \underbrace{|f_I(k) + q(k)|^2}_{S_{el}(k)} S_{II}(k) \delta(\omega) + \underbrace{S_{ee}(\mathbf{k}, \omega)}_{\text{free-free}} + \underbrace{S_{bf}(\mathbf{k}, \omega)}_{\text{bound-free}}, \end{aligned}$$

$$S_{II}(k) = 1 + n_I^0 \widehat{\mathfrak{F}}_s [g(r) - 1],$$

$$q(k) = \widehat{\mathfrak{F}}_s [n_e^{SCR}(r)], \quad \lim_{k \rightarrow 0} q(k) = \bar{Z} \equiv \int_{V_\infty} d\mathbf{r} n_e^{SCR}(r),$$

$$f_I(k) = \widehat{\mathfrak{F}}_s [n_e^{\text{ion}}(r)], \quad |f_I(k)| \geq |q_I(k)|.$$

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_0, \quad k = 2k_0 \sin(\Theta_s/2),$$

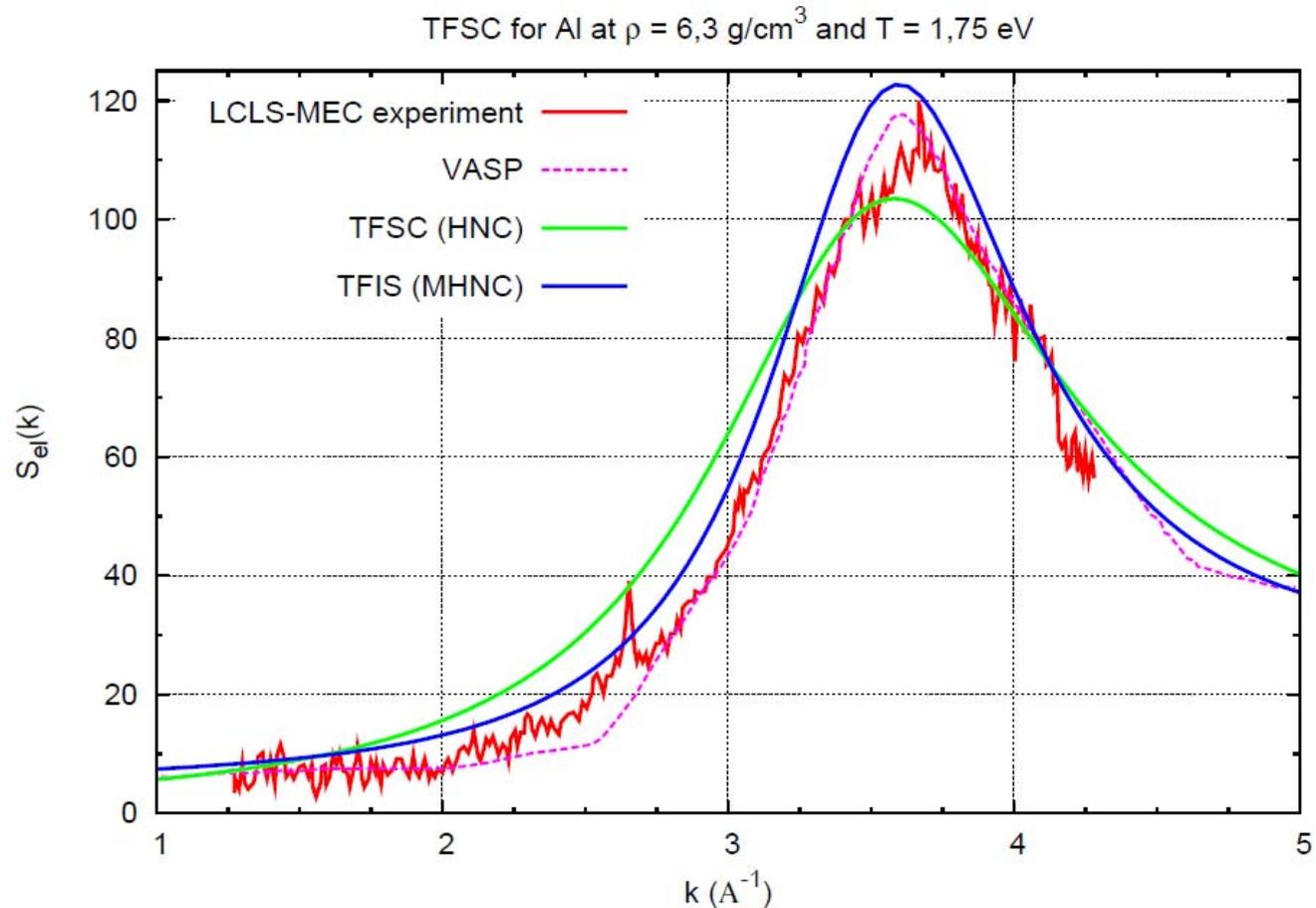
J. Chihara. J. Phys.: Condens. Matt. 12, 231 (2000).

A. N. Souza, D. J. Perkins et al. Phys. Rev. E 89, 023108 (2014).



Некоторые результаты расчётов структурных характеристик

Эксперимент LCLS MEC по определению статического структурного фактора в плотном тёплом Al методом упругого томсоновского рассеяния фотонов (XRTS)



Experiment & VASP calc. — L. B. Fletcher, H. J. Lee et al. Nature Photonics 9, 274 (2015).
MHNC closure — H. Ieytomi, S. Ogata, and S. Ichimaru. Phys. Rev. A 46, 1051 (1992).

Некоторые результаты расчётов тормозных потерь быстрых ионов

- Диэлектрический формализм [1] для тормозной способности $-dE/dx$ ОЭГ:

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{2Z_{eff}^2}{\pi\rho v^2} \int_0^\infty \frac{dk}{k} \int_0^{kv} \frac{\omega \varepsilon_2(k, \omega) d\omega}{\varepsilon_1(k, \omega)^2 + \varepsilon_2(k, \omega)^2}$$

$$\varepsilon(k, \omega; n_e, T) = \varepsilon_1(k, \omega; n_e, T) + i\varepsilon_2(k, \omega; n_e, T)$$

— с учётом обменно-корреляционного взаимодействия электронов

- Приближение локальной электронной плотности [2,3]:

$$\frac{dE}{dx}(v, \rho, T) = \frac{1}{V} \int_V \frac{dE}{dx}(v, n_e(\vec{r}), T) d\vec{r}$$

— торможение на связанных электронах учитывается приближённо: при вычислении их вклада используется ε свободных электронов.

- Z_{eff} — эфф. средний заряд иона с учётом свойств среды (полуэмп. формула) [4].

1. J. Lindhard. Mat. Fys. Medd. K. Dan. Vidensk. Selsk. **28**, 8 (1954).

2. А.Я. Полищук, В.Е. Фортов, В.С. Хлопонин. Письма в ЖТФ **15**, 68 – 73 (1989).

3. P. Wang, T.M. Mehlhorn, J.J. MacFarlane. Phys. Plasmas **5**, 2977 – 2987 (1998).

4. С.Ю. Гуськов и др. Физика плазмы **35**, 771–781 (2009).

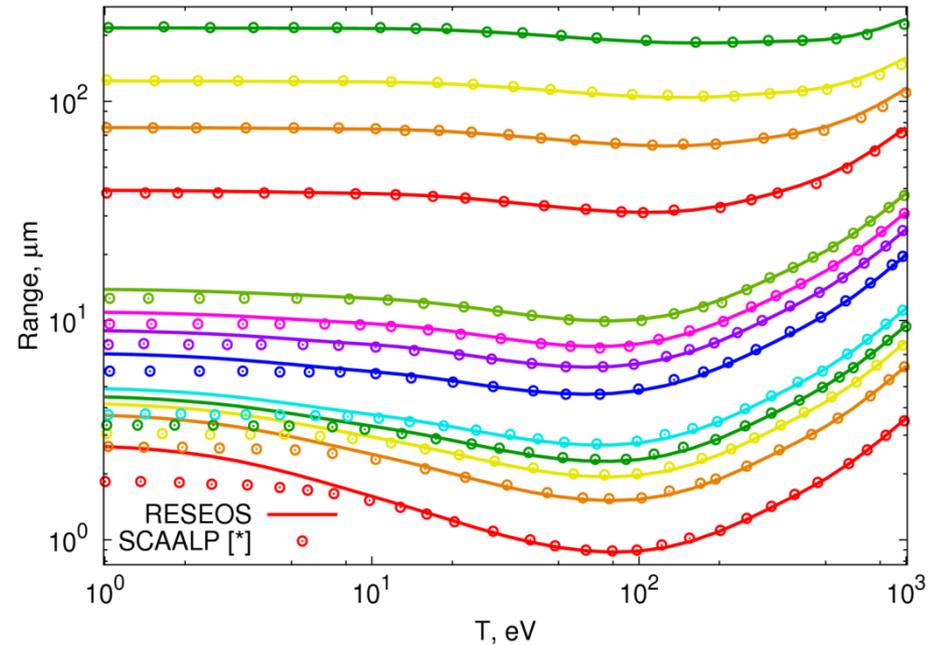
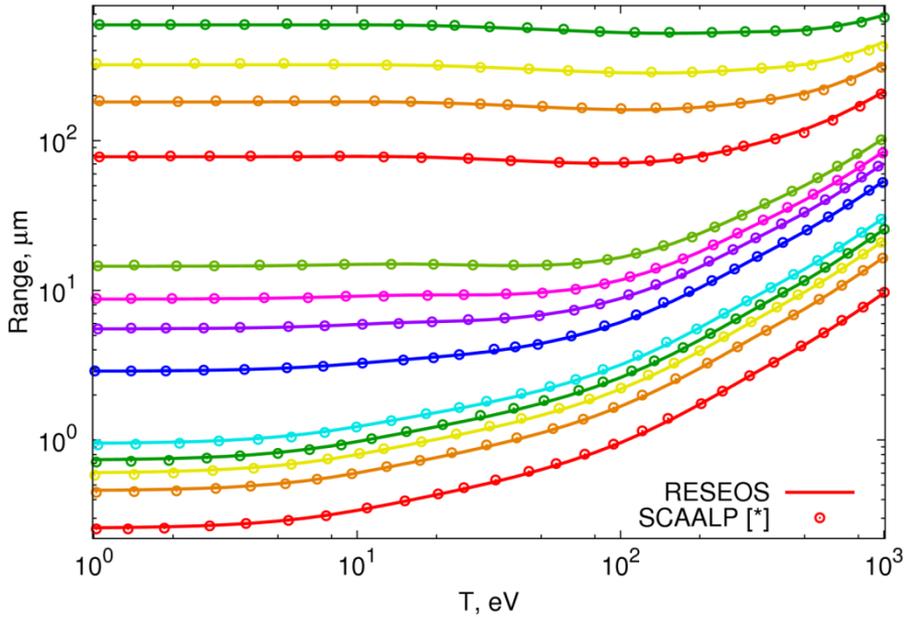


Некоторые результаты расчётов тормозных потерь быстрых ионов

Пробеги протонов ($Z_{\text{eff}}=1$) и ионов углерода в алюминии

$$\text{Range} = - \int_0^{E_0} \frac{dE}{\frac{dE}{dx}(E)}$$

$E_0 = 0.01, 0.03, 0.05, 0.07,$
 $0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1, 3, 5, 7, 10$
МэВ/нуклон

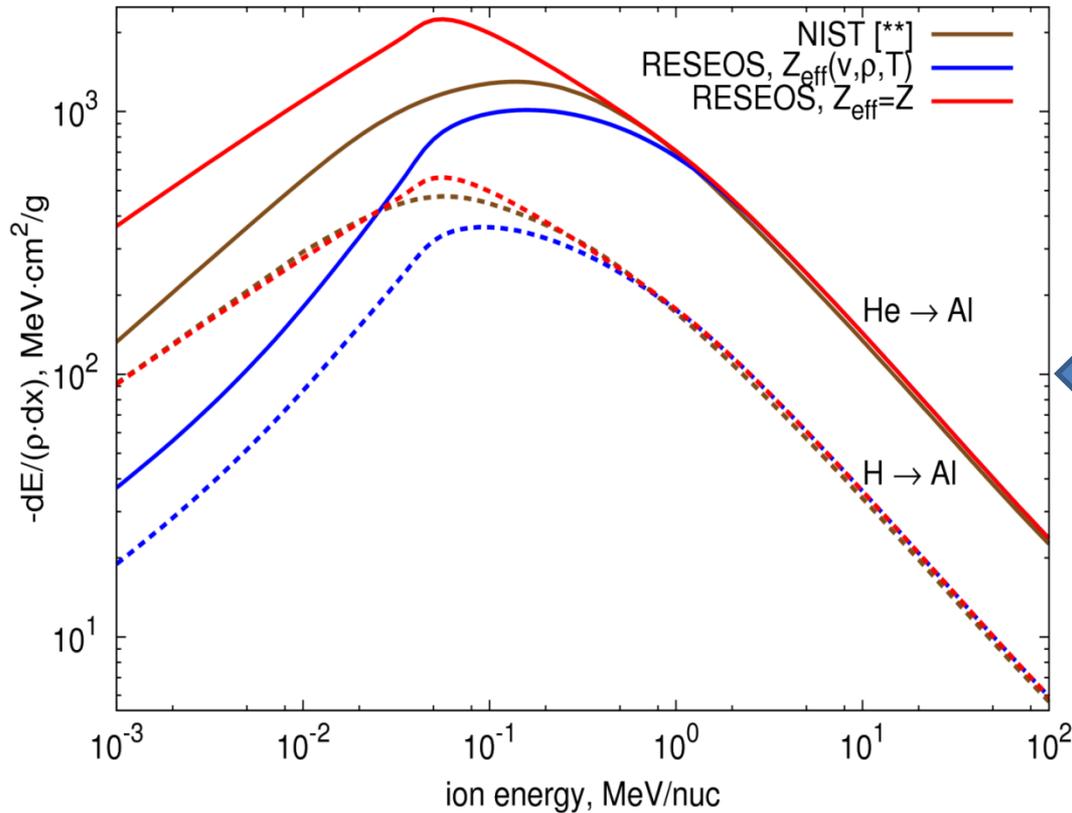


Пробеги протонов, как правило, возрастают с увеличением температуры, в то время как пробеги тяжёлых ионов могут уменьшаться из-за увеличения $Z_{\text{eff}}(v, \rho, T)$ при увеличении T



* G. Faussurier, C. Blancard, P. Cosse, P. Renaudin. PoP **17**, 052707 (2010);
M. Gauthier *et al.* HEDP **9**, 488–495 (2013).

Некоторые результаты расчётов тормозных потерь быстрых ионов



При $Z_{\text{eff}} < 1$ (H, He) использование в расчётах только среднего эфф. заряда может приводить к недооценке тормозных потерь из-за неучёта флуктуаций заряда иона

** Stopping-power and range tables for electrons, protons, and helium ions.

<http://www.nist.gov/physlab/data/star/index.cfm>



Дальнейшее развитие моделей

- Реализация модели среднего атома на основе модели Старретта и Саумона с последовательным учётом ионных корреляций с квантовомеханическим описанием электронов — QMSC.
- Создание методики систематического расчёта термодинамических функций по моделям TFSC, TFIS, QMSC.
- Учёт собственных объёмов ионов в моделях среднего атома.
- Реализация методики систематического расчёта термодинамических и транспортных характеристик по RAMD – модели.
- Уточнение описания столкновительного уширения в моделях RESEOS и CP-SC.
- Завершение разработки нового варианта методики CP-SC .