

文章编号: 1000-5773(2001)04-0271-06

# 氢的高密度等离子体物态方程

李有宽, 陈栋泉, 李茂生, 董 航

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 采用 Thomas-Fermi(TF)方法, 计算了氢的高密度等离子体物态方程, 并引入 TF 等效电离度概念。等效电离度的计算结果表明, TF 方法也可用于宽广温度、密度范围的等离子体物态方程计算, 且在高密度区, 其结果比活度展开法(ACTEX)和 Debye-Huckel(DH)理论更为合理。

关键词: 等离子体; 物态方程; TF 等效电离度

中图分类号: O53

文献标识码: A

## 1 引 言

高温高压下离化物质物态方程的研究一直是物质热力学性质研究领域中的一门重要的分支学科。它在受控核聚变、恒星演化和地球内核构造等方面都有着广泛的应用, 如冲击爆轰产物中含有大量的电离气体; 受控核聚变惯性约束物质就是高温高密度的氢等离子体<sup>[1]</sup>; 木星、土星中含有 40% 以上的离化氢等<sup>[2]</sup>。而在实验中产生高温等离子体更是一件司空见惯的事情, 如激光诱导等离子体<sup>[3]</sup>、由冲击压缩形成的高温等离子体等。近年来, 有关金属氢的研究表明, 氢的金属-绝缘体转变可能是一种一级的等离子体相变<sup>[4,5]</sup>。

计算等离子体物态方程的常用方法如 Saha 方程、Debye-Huckel(DH)理论、R. Abe 粒子数密度展开法<sup>[6]</sup>以及活度展开法(ACTEX)<sup>[7]</sup>, 这些方法的温度、密度适用范围受到限制。DH 理论适合描述稀薄气体的电离相互作用过程, 其适用条件要求带电粒子的平均动能远大于它们之间的平均 Coulomb 相互作用能, 即

$$\frac{3}{2} kT \gg \frac{Z_c^2 e^2}{R} \quad (1)$$

由此得到温度的适用条件为

$$T \gg \frac{2}{3} \frac{e^2 Z_c^2}{k R} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{k} \left( \frac{4\pi N \rho}{3 M} \right)^{1/3} Z_c^2 \quad (2)$$

式中:  $R = [3M/(4\pi N\rho)]^{1/3}$ , 为原子球胞的半径;  $M$  为相对原子质量;  $N$  为 Avogadro 常数;  $\rho$  为物质密度;  $e$  为电子电荷;  $k$  为 Boltzmann 常数;  $Z_c$  ( $0 \leq Z_c \leq Z$ ) 为每个原子离化出来的自由电子数,  $Z$  为原子序数。把  $e, k, N$  有关数值代入(2)式, 得到

$$T[10^4 \text{K}] \gg 15 \left( \frac{\rho}{M} \right)^{1/3} Z_c^2 \quad (3)$$

R. Abe<sup>[6]</sup>把粒子数密度展开法应用到电子气体, 给出物态方程形式为

收稿日期: 2001-02-22; 修回日期: 2001-04-17

基金项目: 中国工程物理研究院基金(990109)

作者简介: 李有宽(1964—), 男, 硕士, 副研究员。

$$\frac{P_e}{nkT} = 1 - \frac{\lambda}{6} - \lambda^2 \left( \frac{\ln 3 \lambda}{12} + \frac{\gamma}{6} - \frac{1}{9} \right) + O(\lambda^3) \quad (4)$$

式中:  $n = \left( \frac{NZ_e}{M} \rho \right)$  为自由电子数密度;  $\lambda = 2\sqrt{\pi} \left( \frac{1}{kT} \right)^{3/2} \cdot e^3 \sqrt{n}$ ;  $\gamma = 0.57721566 \dots$ , 为 Euler 常数。

(4)式右边第二项为 Debye-Huckel 理论结果。该式只适用小的  $\lambda$ , 如果压强修正量为 10%, 则要求  $\lambda \leq 0.54$ , 若取  $\lambda = 1$ , 则对压强的修正量已达 24%, 因此对  $\lambda$  的限制取  $\lambda < 1$ , 即对温度的限制为

$$T[10^4 \text{K}] > 32.8 \left( \frac{\rho}{M} \right)^{1/3} Z_e^{1/3} \quad (5)$$

目前较流行的计算高温低密度等离子体物态方程的方法是 ACTEX(活度展开法), 所谓活度展开法就是直接从系统的巨配分函数出发, 以系统中各种粒子的活度  $Z_i = e^{\mu_i/kT}$  作为展开参数, 来获得高温等离子体物态方程的方法称之为活度展开法, 它是在 Mayer 和 Abe 方法的基础上发展起来的。它的压强表达式为

$$\frac{p}{kT} = Z_a + Z_b + x_R + \sum_{n=2}^{\infty} \left( C_n + Z_a \frac{\partial x_R}{\partial Z_a} \frac{\partial C_n}{\partial Z_a} + Z_b \frac{\partial x_R}{\partial Z_b} \frac{\partial C_n}{\partial Z_b} + \dots \right) \quad (6)$$

式中

$$x_R = S_R + \sum_{m_a=2}^{\infty} x_{m_a} \Big|_{S=S_R} + \sum_{m_b=2}^{\infty} x_{m_b} \Big|_{S=S_R} + Z_a Z_b \frac{\partial S_R}{\partial Z_a} \frac{\partial S_R}{\partial Z_b} \frac{\partial^2 S_R}{\partial Z_a \partial Z_b} + \dots$$

$$C_2 \equiv S_2$$

$$C_3 \equiv S_3 + \frac{Z_a}{2!} \left( \frac{\partial S_2}{\partial Z_a} \right)^2 + \frac{Z_b}{2!} \left( \frac{\partial S_2}{\partial Z_b} \right)^2$$

$$C_4 = S_4 + Z_a \frac{\partial S_2}{\partial Z_a} \frac{\partial S_3}{\partial Z_a} + Z_b \frac{\partial S_2}{\partial Z_b} \frac{\partial S_3}{\partial Z_b} + \frac{Z_a}{3!} \frac{\partial}{\partial Z_a} Z_a \left( \frac{\partial S_2}{\partial Z_a} \right)^3 + \frac{Z_b}{3!} \frac{\partial}{\partial Z_b} Z_b \left( \frac{\partial S_2}{\partial Z_b} \right)^3 + Z_a Z_b \frac{\partial S_2}{\partial Z_a} \frac{\partial S_2}{\partial Z_b} \frac{\partial^2 S_2}{\partial Z_a \partial Z_b}$$

$$S = S_R + \sum_{n=2}^{\infty} S_n$$

$S_R$  代表环形图的贡献, 即 Debye-Huckel 近似,  $S_n$  是高阶微扰项, 详细表达式参考文献[7]。

上述压强展开式只是经典结果, 若考虑量子效应修正, 其活度展开式的形式为

$$\begin{aligned} \frac{p}{kT} = & \frac{\ln Z_0(\alpha_e)}{V} + Z_p + X_R + X_{ex} + S_{2,ee} + 2S_{2,ep} + S_{2,pp} + \\ & Z_e \frac{\partial}{\partial Z_e} (X_R + X_{ex}) \frac{\partial}{\partial Z_e} (S_{2,ee} + 2S_{2,ep} + S_{2,pp}) + \\ & Z_p \frac{\partial}{\partial Z_p} (X_R + X_{ex}) \frac{\partial}{\partial Z_p} (S_{2,ee} + 2S_{2,ep} + S_{2,pp}) \end{aligned} \quad (7)$$

(7)式中有量的细节请参考文献[7]。

ACTEX 方法在热力学波长小于等离子体屏蔽长度的条件下才能给出较好的结果。适用条件为

$$\frac{\lambda_T}{\lambda_D} < 1 \quad (8)$$

式中:  $\lambda_T = (h/2\pi mkT)^{1/2}$  为热波长,  $\lambda_D = (kT/4\pi e^2 \sum_i n_i Z_i^2)^{1/2}$  为 Debye 屏蔽长度。  $h$  为 Planck 常数,  $m$  为电子质量,  $M$  为相对原子质量。

对于氢等离子体

$$\lambda_D = (MkT/4\pi e^2 NZ_e^2 \rho)^{1/2}$$

把  $\lambda_T, \lambda_D$  代入(8)式, 得到温度的适用条件为

$$T > \sqrt{2}(N/m)^{1/2} \frac{eh}{k} Z_e (\rho/M)^{1/2} \quad (9)$$

或

$$T[10^4 \text{K}] > 83.4 Z_e (\rho/M)^{1/2} \quad (10)$$

对于氢等离子系统,  $M = 1$ , 取  $\rho = 0.01 \text{g/cm}^3$ ,  $Z_e = 0.6$  (部分电离), 则上述各种理论的适用条件分别为

$$\text{DH} \quad T \gg 1.2 \times 10^4 \text{K}$$

$$\text{R. Abe} \quad T > 6.0 \times 10^4 \text{K}$$

$$\text{ACTEX} \quad T > 5.0 \times 10^4 \text{K}$$

如果密度  $\rho = 1 \text{g/cm}^3$ , 上述温度限则提高一个量级, 因而, 在更高密度而温度又不太高的情况下, 上述三种理论均不适用。

我们的研究工作表明, Thomas-Fermi (TF) 理论不但可以用以描述高密度物质物态方程, 也可以描述高温低密度物态方程, 利用 TF 理论给出的物态方程在超高温下能自动过渡到全电离理想气体物态方程。为了给出适用  $\rho, T$  大范围下的等离子体物态方程。本文中引入 TF 等效电离度来描述等离子体中电子对热压和热能的贡献, 而离子部分视为理想气体。冷压和冷能则另行处理。

## 2 Thomas-Fermi (TF) 等效电离度

TF 理论是一种统计模型, 它利用 Poisson 方程描述中性原子中的电子之间以及电子与核的库仑相互作用。DH 理论是 Poisson 方程的高温展开, 而 TF 方程是严格求解。从模型上来讲, 在高温低密度下, TF 理论中的电子将从 Fermi-Dirac 分布过渡到 Maxwell-Boltzmann 分布。因此, TF 理论应能反映 DH 结果并能自动过渡到全电离理想气体物态方程。实际上, 研究工作表明, TF 理论既可以描述高密度物质物态方程, 也可以描述高温低密度物态方程。本文中采用 TF 理论计算氢的等离子体物态方程。

为了和现有的等离子体物态方程理论结果<sup>[7]</sup>相比较, 我们引入 TF 等效电离度  $\alpha$ , 其定义为

$$p_e(\rho, T) = \alpha Z \frac{Nk}{M} \rho T \quad (11)$$

即在温度和压力的作用下, 原子序数为  $Z$  的原子离化出的自由电子数  $Z_e$  由  $Z_e = \alpha Z$  来确定, 这些自由电子对压强的贡献用理想气体(11)式来描述, 而它们的值由 TF 电子热压  $p_e(\rho, T)$  来确定。在 Thomas-Fermi 理论中电子热压  $p_e(\rho, T)$  由下式给出

$$p_e(\rho, T) = p_{\text{TF}}(\rho, T) - p_{\text{TF}}(\rho, T = 0) \quad (12)$$

式中  $p_{\text{TF}}(\rho, T)$  为  $T \neq 0$  时的 Thomas-Fermi 压强,  $p_{\text{TF}}(\rho, T = 0)$  为  $T = 0$  时的压强, 通常称为冷

压。有关 TF 方程求解细节见文献[8,9]。

在 TF 理论中,核是固定不动的。为了给出等离子体物态方程,需加上核的贡献,核的贡献通常用理想气体模型,则总的热压为

$$p = (1 + Z_e) \frac{Nk}{M} \rho T \quad (13)$$

上式可改写成

$$\frac{pV}{NkT} = 1 + Z_e \quad (14)$$

式中:  $V = M/\rho$  为摩尔体积,压强  $p$  不包括冷压。若冷压  $p_c(\rho, T=0)$  不能忽略时,(13)式变为

$$p = p_c + (1 + Z_e) \frac{Nk}{M} \rho T \quad (15)$$

### 3 计算结果与分析

我们采用 TF 理论,按(11)式~(14)式等公式计算了氢等离子体在较宽温度( $T$ )和密度( $\rho$ )范围内的  $pV/NkT$ ,数值结果列于表 1。为了详细比较不同理论之间的差异,表中还列入了文献[7]提供的量子活度展开法(ACTEX-Q)和考虑 Debye-Huckel 修正的 Saha 方法的结果。并

表 1 氢等离子体的  $pV/NkT$  值

Table 1  $pV/NkT$  for the plasma hydrogen

$V/(\text{cm}^3/\text{mol})$		$T/(\text{eV})$									
		1	2	3	5	7.5	10	13.6	15	20	27.19
$10^4$	TF	1.432	1.610	1.716	1.830	1.895	1.929	1.95	1.959	1.972	1.981
	ACTEX-Q	0.987	1.303	1.725	1.923	1.963		1.986			1.995
	Saha-DH	1.005	1.329	1.732	1.916	1.960		1.986			1.995
$10^3$	TF	1.355	1.506	1.607	1.74	1.82	1.87	1.95	1.924	1.947	1.963
	ACTEX-Q	0.956	1.093	1.393	1.75	1.88		1.955			1.984
	Saha-DH	0.978	1.121	1.382	1.714	1.857		1.948			1.982
200	TF	1.326	1.45	1.537	1.658	1.751	1.812	1.861	1.88	1.915	1.963
	ACTEX-Q	0.904	1.03	1.233	1.567	1.754		1.899			1.964
	Saha-DH	0.911	1.038	1.164	1.467	1.684		1.869			1.954
100	TF	1.317	1.431	1.515	1.63	1.718	1.78	1.834	1.855	1.894	1.924
	ACTEX-Q			1.202	1.487	1.675		1.857			1.945
	Saha-DH			1.048	1.343	1.579		1.812			1.932
50	TF	1.305	1.414	1.489	1.597	1.686	1.748	1.806	1.826	1.872	1.906
	ACTEX-Q				1.441	1.603		1.786			1.909
	Saha-DH				1.206	1.482		1.736			1.897
20	TF	1.269	1.382	1.455	1.555	1.64	1.70	1.759	1.782	1.832	1.874
	ACTEX-Q					1.478		1.634			1.794
	Saha-DH					1.292		1.610			1.832

将部分结果表示在图 1 中。

图 1 中还列入了经典屏蔽势 ACTEX 的结果。以 ACTEX-Q 的结果为标准,对各种模型进行比较,图 1 表明,在  $T > 5\text{eV}$ ,即在 ACTEX 的适用区,TF 结果与 ACTEX 理论符合良好,且稍优于 Saha 结果,TF 理论也可作为描述等离子体物态方程的方法。通过(14)式可较精确地给出高温低密度下物质的电离电子数  $Z_e$ 。

随着温度的下降,TF 与 ACTEX 的差别越来越大,根据第一节分析,在  $T < 5\text{eV}$  时,ACTEX 和 Saha 模型已不太适用,所以 ACTEX 不能作为比较标准。

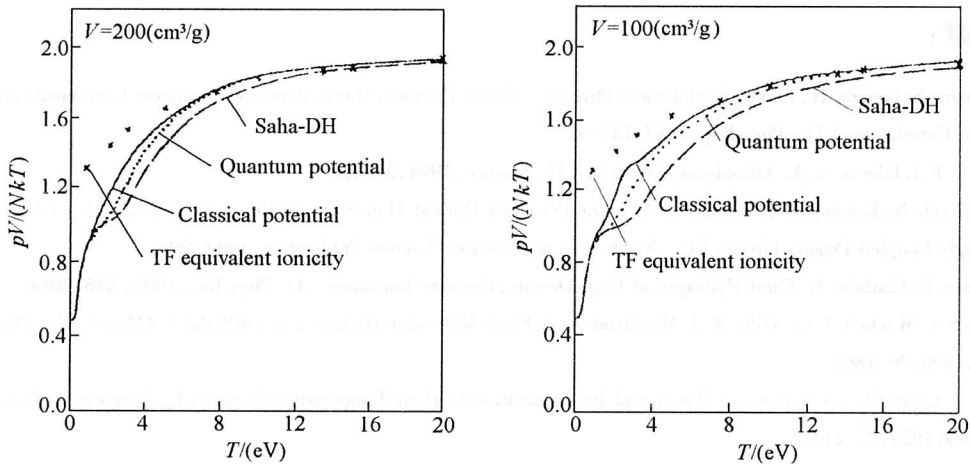


图 1  $pV/NkT$  不同理论结果比较

Fig.1 Results of different theories for  $pV/NkT$

表 2 TF 等效电离度  $\alpha$ (TF)

Table 2 Thomas-Fermi equivalent ionicity

$\rho/(\text{g}/\text{cm}^3)$	$T/(\text{eV})$						
	5	7	10	15	20	30	50
0.005	0.658	0.737	0.812	0.880	0.915	0.948	
0.01	0.626	0.704	0.781	0.855	0.895	0.935	
0.0166	0.604	0.680	0.757	0.834	0.878	0.924	0.959
0.0332	0.574	0.646	0.723	0.803	0.851	0.904	0.947
0.083	0.530	0.599	0.673	0.755	0.808	0.870	0.925
0.166	0.485	0.555	0.629	0.712	0.768	0.837	0.902
0.332	0.424	0.497	0.574	0.661	0.719	0.794	0.871
0.83	0.326	0.396	0.478	0.571	0.636	0.721	0.831
1.66	0.265	0.317	0.390	0.485	0.554	0.647	0.753
3.32	0.133	0.261	0.310	0.389	0.457	0.556	0.676
8.3	0.0735	0.103	0.147	0.286	0.331	0.418	0.545
16.6	0.0467	0.0653	0.0935	0.140	0.267	0.323	0.434
83	0.0162	0.0227	0.0325	0.0487	0.065	0.0945	0.162
166	0.0103	0.0144	0.0206	0.0308	0.0411	0.0617	0.103

文献[9]指出,考虑库仑相互作用,DH修正对压强的贡献是负的,所以计及DH作用的Saha方法给出的物态方程在低温区比实际要低,当密度高于某一值时将出现总的负压强。对于TF结果不会出现这种情况。为阐述这种情况,在表2中列出了氢的TF等效电离度 $\alpha$ 的数据。从表中数据可以看出,TF等效电离度 $\alpha$ 随着温度的升高而逐渐接近1,也即发生电子的完全离化。而在同一温度的不同密度处始终不出现负值,因此,根据公式(14),将不产生负压的问题。这样在ACTEX展开不适用和Saha方法产生负压区的情况下,TF理论仍可用来描述等离子体物态方程。

### 参考文献:

- [1] Ichimaru S, Iyetemi H, Tanaka S. Statistical Physics of Dense Plasmas: Thermodynamics Transport Coefficients and Dynamic Correlations [J]. Phys Rep, 1987, 149: 91.
- [2] Rogers F J, Iglesias C A. Astrophysical Opacity [J]. Science, 1994, 263: 50.
- [3] Mostovych N, Keamey K J, Stamper J A. Laser Produced Optical-Thin Strongly Coupled Plasmas [A]. Ichimaru S. Strongly Coupled Plasma Physics [C]. North-Holland: Elsevier Science Publication, 1990. 589.
- [4] Saumon D, Chabrier G. Fluid Hydrogen at High Density: Pressure Ionization [J]. Phys Rev, 1992, A46: 2084.
- [5] Weir S T, Mitchell A C, Nellis W J. Metallization of Fluid Molecular Hydrogen at 140GPa (1.4Mbar) [J]. Phys Rev Lett, 1990, 76: 1860.
- [6] Abe R. Giant Cluster Expansion Theory and Its Application to High Temperature Plasma [J]. Progress of Theoretical Physics, 1959, 22: 213.
- [7] Rogers F J, Dewitt H E. Statistical Mechanic of Reacting Coulomb Gases [J]. Phys Rev, 1973, A18(2): 1061.
- [8] Latter R. Temperature Behavior of the Thomas-Fermi Statistical Model for Atoms [J]. Phys Rev, 1955, 99: 1854.
- [9] 徐锡申. 实用物态方程理论导引 [M]. 北京: 科学出版社, 1986. 138.

## THE EQUATION OF STATE FOR THE PLASMA HYDROGEN AT HIGH DENSITY

LI You-kuan, CHEN Dong-quan, LI Mao-sheng, DONG Hang

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

**Abstract:** The equations of state were calculated with Thomas-Fermi (TF) method and TF equivalent ionicity was introduced for the plasma hydrogen. The calculated results of the equivalent ionicity indicated that TF method can be used in wide range of the temperature ( $T$ ) and density ( $\rho$ ), and is more reasonable than ACTEX and DH methods at high density.

**Key words:** plasma; EOS; TF equivalent ionicity