Archive of SID

مجلهٔ پژوهش فیزیک ایران، جلد ۱۶، شمارهٔ ۲، تابستان ۱۳۹۵

محاسبهٔ تصحیحات ترمودینامیکی ناشی از اثرات تبادلی الکترونی در مدل توماس- فرمی برای پلاسمای داغ و چگال

حسن حسین خانی[۱] و امیرحسین اسماعیلیان عراقی[۲]

۱. پژوهشکدهٔ پلاسما و گداخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران

۲. گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد قم

پست الکترونیکی: hhosseinkhani@aeoi.org.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۳/۴/۲۳ ؛ دریافت نسخهٔ نهایی: ۱۳۹۴/۱۰/۱۳)

چکیده

در این مقاله با در نظر گرفتن اثرات برهم‌کنش تبادلی الکترونی پلاسما، ابتدا به حل عددی معادلات توماس- فرمی به طور مستقیم پرداخته و سپس با استفاده از جواب‌های به دست آمده از این معادلات، بزرگی مقدار تصحیحات تبادلی فشار و انرژی داخلی پلاسمای نوعی را (گاز اتمی با عدد اتمی معین) برحسب تغییرات چگالی و دما محاسبه کرده‌ایم. نتایج محاسبات می‌تواند در بررسی کمی و کیفی تغییرات فاز ماده در دما و چگالی بالا در تحقیقات تجربی و نظری گداخت به روش محصورسازی لختی و همچنین پدیده‌های اخترفیزیکی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: پلاسمای داغ و چگال، معادلات حالت، اثرات تبادلی الکترونی، مدل توماس- فرمی، گداخت محصورسازی لختی

۱. مقدمه

در دست داشتن معادلهٔ حالت ماده برای فهم خواص ترمودینامیکی آن در دما و چگالی مورد نظر ضروری است [۱ و ۲]. دستیابی به تصویری صحیح از رفتار ماده در محدودهٔ دما و چگالی بالا از طریق مدل‌های سادهٔ ترمودینامیکی امکان‌پذیر نبوده و همچنین روش‌های تجربی نیز برای مطالعهٔ مواد در چنین شرایطی با دشواری‌های تکنیکی متعددی مواجه است. از این روی بررسی خواص مادهٔ چگال داغ به کمک روش‌های نظری مبتنی بر آمار کوانتمی اخیراً مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. معادلهٔ حالت ماده را می‌توان بر پایهٔ مدل دستگاهی شامل الکترون‌های تبهگن و یون‌های جفت‌شده محاسبه کرد [۳- ۵].

شناخت معادلات حالت پلاسمای داغ و چگال به عنوان بخشی مهم از پژوهش در زمینهٔ گداخت لختی در چند دههٔ اخیر محسوب می‌شود. محاسبهٔ فشردگی و رفتار ترمودینامیکی مادهٔ هدف در پدیدهٔ گداخت، به روش محصورسازی لختی[۱] و همچنین در ابر نواخترها، مستلزم محاسبهٔ دقیق معادلهٔ حالت برای ناحیهٔ وسیعی از مقادیر دما و چگالی است [۶ و۷]. پس از

۱. Inertial confinement fusion

www.SID.ir

Archive of SID

اندرکنش لیزر و یا یون‌های پر انرژی با سطح مادهٔ هدف و شکل‌گیری پلاسما، در طی فرآیند فشردگی مادهٔ هدف تا مرحلهٔ افروزش[۱] و احتراق[۲]، آنچه که رفتار مادهٔ تحت فشار در فرآیند انفجار به درون را مشخص می‌کند، معادلات حالت ماده است. در شرایط مختلفی از فشار، دما و چگالی مواد مختلف رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهند که این خواص با مدل‌های کلاسیکی و کوانتومی مختلفی مورد بررسی قرار می‌گیرند. مدل توماس- فرمی مبتنی بر آمار کوانتمی فرمی- دیراک را می‌توان روشی کارآمد در محاسبهٔ معادلهٔ حالت مادهٔ متراکم، مایعات و گازهای چگال، در محدودهٔ $\Gamma \geq ۱۰۰$، در نظر گرفت [۸]. Γ پارامتر جفت‌شدگی عبارت است از $\Gamma = \frac{Z^{۲}e^{۲}}{r_{۰}k_{B}T}$ که در آن Z عدد اتمی، $r_{۰} = \frac{۱}{a_{۰}}\left(\frac{۳}{۴\pi n}\right)^{۱/۳}$ شعاع یاخته اتمی، $a_{۰}$ شعاع اتم بور و n تعداد هسته‌ها در واحد حجم ماده و T بیانگر دمای ماده است. اساس مدل توماس- فرمی بر پایهٔ حل معادلهٔ پواسن با در نظر گرفتن برهم‌کنش الکترون- هسته به کمک آمار کوانتمی فرمی در مدل ژله‌ای[۳] الکترونی بنا شده است. این مدل از جمله مدل‌های موفق جهت بررسی رفتار و معادلات حالت ماده در شرایط حاکم بر گداخت لختی نیز محسوب می‌شود [۹ و ۱۰].

از آنجا که در روش توماس- فرمی از اثرات تبادلی بین ذرات پلاسما چشم پوشی می‌شود، نتایج به دست آمده برای پارامترهای ترمودینامیکی پلاسما نظیر فشار، انرژی و آنتروپی با تغییرات چگالی و عدد اتمی عناصر تشکیل دهندهٔ گاز، با خطا همراه می‌باشد. معادلات حالت پلاسمای داغ و چگال با استفاده از مدل توماس- فرمی بدون در نظر گرفتن اثرات تبادلی در دمای صفر و غیر صفر قبلاً محاسبه شده و مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۸]. از این روی در تحقیق حاضر با در نظر گرفتن پتانسیل مؤثر تبادلی الکترونی و برهم‌کنش اسپینی الکترون‌های اتم‌های تشکیل دهندهٔ پلاسما، تصحیحات اثر تبادلی روی مقادیر فشار، انرژی پلاسمای داغ به ازای چگالی و اعداد اتمی مختلف با حل معادلات تصحیح شدهٔ توماس- فرمی به روش عددی محاسبه شده است. مقادیر محاسباتی برای اعداد اتمی، چگالی و دمای دلخواه پلاسما و همچنین مقادیر مقایسه‌ای آنها برای عناصر مختلف به ازای دما و چگالی‌های متفاوت به دست آمده است.

نتایج محاسبات، بزرگی اثرات تبادلی در مقادیر به دست آمده برای انرژی و فشار پلاسمای داغ و چگال را به ازای افزایش چگالی و عدد اتمی گاز نشان می‌دهد.

۲. مدل و نظریه

دقت روش‌های محاسباتی به منظور به دست آوردن پتانسیل اتمی پلاسما، شامل ذرات با عدد اتمی دلخواه در دما و چگالی‌های معین، مبتنی بر مدل توماس- فرمی، به میزان بزرگی اثرات کوانتمی تبادلی بر روی پتانسیل اتمی بستگی دارد. در ابتدا مدل توماس- فرمی با در نظر گرفتن اثرات تبادلی برای دمای $T = ۰$ تعمیم داده شد و سپس این مدل بر اساس تصحیحات کوانتمی تبادلی برای محدودهٔ دما و چگالی‌های دلخواه به نام مدل توماس- فرمی تصحیح‌شده[۴] نام گرفت.

معادلهٔ تصحیح‌شدهٔ توماس- فرمی با اعمال اثرات تبادلی در مختصات کروی با استفاده از متغیر $x = \frac{r}{r_{۰}}$ و شرایط مرزی $\phi(۰) = ۰,\ \phi'(۱) = \phi(۱)$ عبارت است از [۱۱]

$$\phi''(x) - \frac{۴\sqrt{۲}}{\pi} r_{۰}^{۲} I'_{۱/۲}\left(\frac{\mu(x)}{x}\right)\phi(x) = \frac{۴\sqrt{۲}}{\pi} r_{۰}^{۲} x Y'\left(\frac{\mu(x)}{x}\right). \quad (۱)$$

در معادلهٔ فوق $r_{۰} = ۱/۳۸۸\left(\frac{A}{\rho}\right)^{۱/۳}$ شعاع سلول اتمی، A عدد جرمی، ρ چگالی ماده، $I_k(x) = \int_{۰}^{+\infty} \frac{y^k}{۱+\exp(y-x)} dy\ (k \geq -۱)$ انتگرال مرتبهٔ k فرمی و تابع $Y(x)$ به صورت زیر تعریف می‌شود

$$Y(x) = I_{۱/۲}(x) I'_{۱/۲}(x) + ۶\int_{-\infty}^{x} \left[I'_{۱/۲}(t)\right]^{۲} dt, \quad (۲)$$

۱. Ignition

۲. Burning

۳. Jellium model

۴. Thomas-Fermi with Correction (TFC)

www.SID.ir

Archive of SID

و همچنین داریم $\frac{\phi(x)}{x}=\frac{V_{ex}(r)+\mu}{k_BT}$ که در آن $V_{ex}(r)$، μ و k_BT به ترتیب بیانگر پتانسیل مؤثر تبادلی، پتانسیل شیمیایی و دما بوده و تابع $\phi(x)$ جواب معادلهٔ همگن توماس- فرمی در دمای معین T، بدون اعمال اثرات تبادلی الکترونی به شکل زیر است

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}=\frac{4}{3\pi}\sqrt[3]{2}\,r_0^2\,x\,I_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{x}\right) \qquad (3)$$

که با شرایط مرزی $\phi(0)=Z$, $\phi'(0)=\phi(0)=\frac{Z}{r_0}$ حل می‌شود. صفر بودن پتانسیل روی دیوارهٔ سلول اتمی الزام می‌کند که داشته باشیم $\phi(0)=\mu$.

رابطهٔ تقریبی $V_{ex}(r)$ به کمک بسط تابع چگالی الکترونی برحسب ثابت $\hbar$ در تقریب هارتری- فوک به دست آمده است [۱۱]. همچنین از روش‌های مختلف دیگری نظیر درون‌یابی نیز برای محاسبهٔ تصحیحات تبادلی پتانسیل اتمی در دمای صفر استفاده می‌شود [۱۲].

تصحیحات فشار و انرژی داخلی الکترونی پلاسما با استفاده از مدل تصحیح شدهٔ توماس- فرمی ناشی از اثرات تبادلی برابر است با [۱۳ و۱۴]

$$\Delta p=\frac{-2}{3\pi^3}\left[\eta(0)I_{1/2}(\phi(0))+Y(\phi(0))\right] \qquad (4)$$

$$\Delta E=\frac{2^{-2}}{3\pi^2}r_0^2\left[\int_0^1 x\,\eta(x)I_{1/2}(x)dx+2\int_0^1 x^2Y\left(\frac{\phi(x)}{x}\right)dx\right] \qquad (5)$$
$$+\frac{Z\sqrt{2}}{6\pi}\eta'(0)-\Delta E_0\,,$$

که در آن داریم [۱۰]

$$\Delta E_0=-0.269001\,7Z^{5/3}.$$

محاسبهٔ تصحیحات تبادلی فشار و انرژی داخلی پلاسما تنها با در دست داشتن توابع $\phi(x)$ و $\eta(x)$، یعنی جواب معادلات (۱) و (۳)، امکان پذیر است. از روش‌های متداول حل معادلات (۱) و (۳) در دما و چگالی مورد نظر می‌توان دو روش پرتاب[1] [۱۵] و روبش دوتایی[2] [۱۶] را نام برد. استفاده از هر یک از این روش‌ها با پیچیدگی‌های محاسباتی همراه بوده و در محدودهٔ خاصی از مقادیر امکان‌پذیر است به طوری که از آنها می‌توان در حل معادلهٔ توماس- فرمی بدون در نظرگرفتن اثرات تبادلی استفاده کرد، زیرا نتیجهٔ محاسبات از این دو روش در ناحیهٔ دمایی بالا با در نظرگرفتن اثرات تبادلی با خطای بالایی همراه است. از این روی، به حل معادلات (۱) تا (۳) با استفاده از نرم‌افزار محاسباتی در بازهٔ دمائی و چگالی دلخواه و با استفاده از مقادیر زیر پرداخته‌ایم

$$\phi(0)=\frac{Z}{r_0}\sim\left(\frac{0}{AZ}\right)^{1/3}\frac{Z^{4/3}}{\mu},$$
$$\frac{4}{3\pi}\sqrt[3]{2}\,r_0^2\sim\left(\frac{AZ}{0}\right)^{2/3}\left(\frac{\mu}{Z^{4/3}}\right)^{1/2}. \qquad (6)$$

با در دست داشتن جواب‌های معادلات (۱) و (۳)، توابع تصحیحات فشار و انرژی داخلی پلاسما، $\Delta E=\Delta E(0,T)$ و $\Delta P=\Delta P(0,T)$ را برحسب تغییرات دما و چگالی برای هر نوع گاز اتمی نوعی با Z معین محاسبه کرده‌ایم.

۳. نتایج محاسبات عددی

در این بخش به ارائهٔ نتایج به دست آمده حاصل از حل عددی معادلات توماس- فرمی تصحیح شده با اعمال اثرات برهم‌کنش تبادلی الکترونی برای دو گاز اتمی نوعی He و Al می‌پردازیم.

در شکل ۱ تغییرات تصحیحات فشار پلاسما ناشی از برهم‌کنش تبادلی $\Delta P(\mathrm{GPa})$، برحسب تغییرات چگالی پلاسما $0\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^3}\right)$ برای He به ازای دماهای ۱۰ KeV و $T=1$ رسم شده است. از این نمودار، می‌توان افزایش تصحیحات فشار با افزایش دمای پلاسما را مشاهده کرد. همچنین می‌توان نتیجه گرفت که در دماهای بالا افزایش چگالی موجب افزایش اثرات تبادلی در فشار پلاسما خواهد شد. در شکل ۲ مقادیر فشار پلاسما بدون در نظر گرفتن اثرات تبادلی جهت مقایسه ارائه شده است.

شکل ۳ مقایسهٔ تصحیحات فشار برحسب دمای پلاسما برای Al و He در چگالی ثابت $0=1000\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^3}\right)$ را نمایش

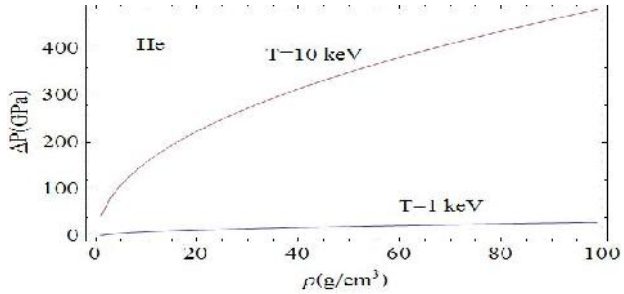
---

۱. Shooting

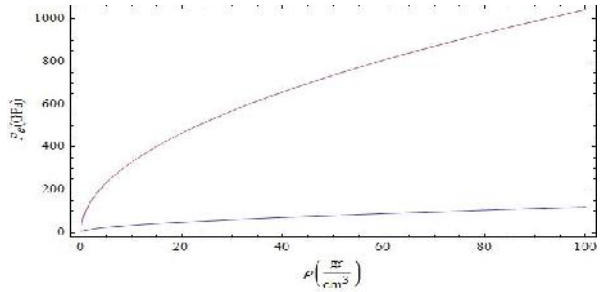
۲. Double sweep

www.SID.ir

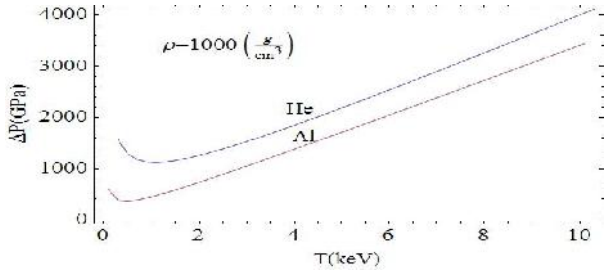
Archive of SID



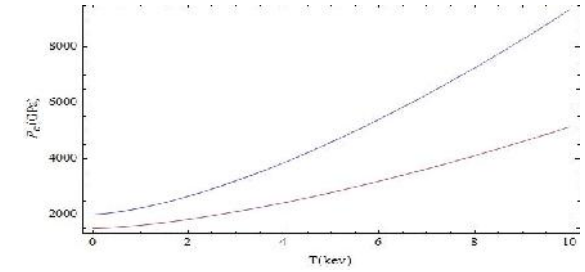
شکل ۱. مقادیر تصحیحات فشار پلاسما ناشی از برهم‌کنش تبادلی $\Delta P(GPa)$ برحسب تغییرات چگالی پلاسما $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)=$ ° برای He به ازای دمای ۱۰KeV و $T=$ ۱.



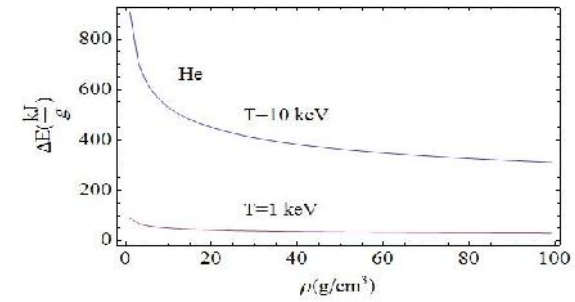
شکل ۲. مقادیر فشار پلاسما بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش تبادلی برحسب تغییرات چگالی پلاسما $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)=$ ° برای He به ازای دمای ۱۰KeV و $T=$ ۱.



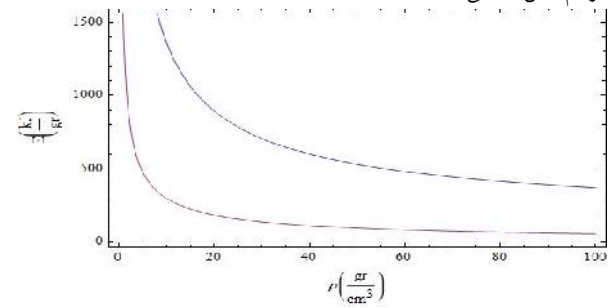
شکل ۳. مقایسه تصحیح فشار برحسب دمای پلاسما T (KeV) برای Al و He به ازای چگالی $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)=$ ۱۰۰۰ °.



شکل ۴. مقادیر فشار برحسب دمای پلاسما T (KeV) برای Al و He به ازای چگالی $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)=$ ۱۰۰۰ ° بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش تبادلی.



شکل ۵. نمودار تصحیح انرژی $\Delta E(\frac{KJ}{g})$ برحسب چگالی پلاسما $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)$ ° برای He به ازای دماهای ۱۰KeV و $T=$ ۱.



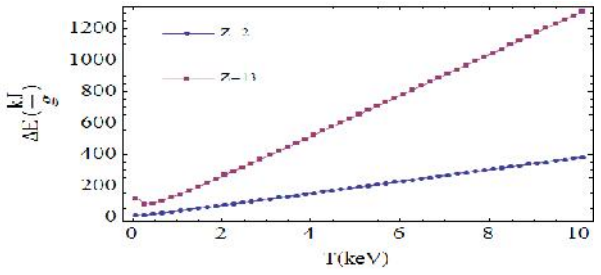
شکل ۶. مقادیر انرژی برحسب چگالی پلاسما $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)$ ° برای He به ازای دماهای ۱۰KeV و $T=$ ۱ بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش تبادلی.

می‌دهد. همچنین شکل ۳ بیانگر افزایش مقدار تصحیحات فشار با افزایش دما است. از این نمودار می‌توان نتیجه گرفت که به دلیل کوچک‌تر بودن عدد اتمی عنصر He نسبت به Al، بزرگی مقدار ΔP برای گاز He نسبت به Al بیشتر است. شکل ۴ نمودار تغییرات فشار را بدون در نظرگرفتن برهم‌کنش تبادلی برای همین عناصر در چگالی مورد اشاره نمایش می‌دهد.

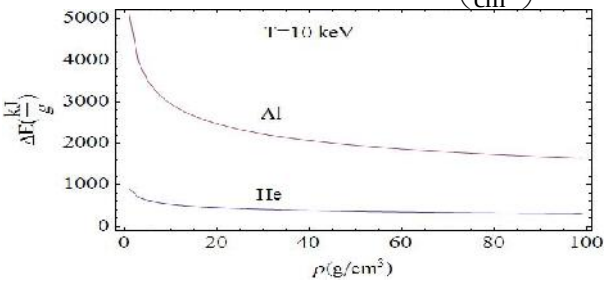
در شکل ۵ نمودار تصحیح انرژی $\Delta E(\frac{KJ}{g})$ برحسب چگالی پلاسما $\left(\frac{gr}{cm^3}\right)$ ° برای He به ازای دماهای $T=$ ۱ و ۱۰KeV به نمایش در آمده است. با استفاده از این نمودار می‌توان افزایش چشمگیر مقدار تصحیحات انرژی با افزایش دما را نیز مشاهده کرد که مقدار این تصحیحات در دمای ثابت، برای چگالی‌های بالای دستگاه، به مقدار حدی معینی می‌رسد. نمودار تغییرات انرژی برای He به ازای همین دماها ولی بدون لحاظ کردن اثرات تبادلی برحسب چگالی پلاسما در شکل ۶ ارائه شده است.

www.SID.ir

Archive of SID



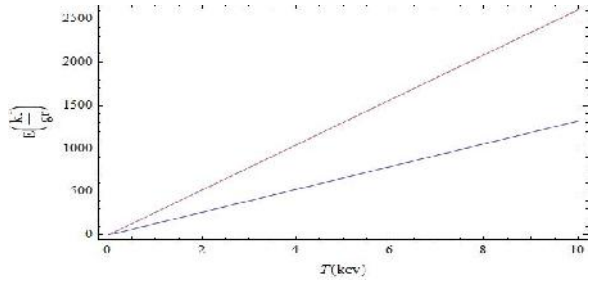
شکل ۷. مقادیر تصحیح انرژی تبادلی $\Delta E(\frac{\mathrm{KJ}}{\mathrm{g}})$ برحسب تغییرات دمای پلاسما T (KeV) برای $\mathrm{He}(Z=۲)$ و $\mathrm{Al}(Z=۱۳)$ به ازای چگالی $\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^۳}\right)=۱۰۰$ °.



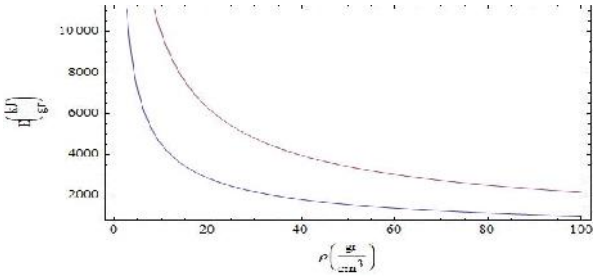
شکل ۹. مقادیر مقایسه‌ای تصحیح انرژی تبادلی $\Delta E\left(\frac{\mathrm{KJ}}{\mathrm{g}}\right)$ برحسب تغییرات چگالی پلاسما $\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^۳}\right)=$ ° برای Al و He به ازای دمای $T=۱۰\mathrm{KeV}$.

شکل ۷ تغییرات مقدار تصحیحات انرژی داخلی پلاسما را برحسب دما برای گازهای He و Al به ازای چگالی ثابت $\left(\frac{gr}{cm^۳}\right)=۱۰۰$ ° نشان می‌دهد. با استفاده از این نمودار می‌توان نتیجه گرفت که تصحیحات انرژی پلاسما ناشی از اثرات تبادلی با افزایش دما چشمگیر است، هر چند که در دماهای پایین مقدار این تصحیحات مستقل از عدد اتمی گاز تشکیل دهندهٔ پلاسما بوده و ناچیز است. افزایش چگالی پلاسما موجب کاهش مقدار ΔE می‌شود. این نتیجه با توجه به پیش‌بینی چشمگیر بودن اثرات تبادلی الکترونی در چگالی‌های پائین‌بر اساس مدل ژله‌ای، به خوبی قابل توجیه است. شکل ۸ نمودار مقادیر انرژی داخلی را با شرایط مشابه شکل ۷ ولی بدون در نظر گرفتن اثرات تبادلی نمایش می‌دهد.

در شکل ۹ مقادیر مقایسه‌ای تصحیح انرژی داخلی تبادلی برحسب تغییرات چگالی پلاسما $\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^۳}\right)$ ° برای Al و He به ازای دمای $T=۱۰\mathrm{KeV}$ نمایش داده شده است. با استفاده



شکل ۸. نمودار مقادیر انرژی تبادلی برحسب تغییرات دمای پلاسما T (KeV) برای $\mathrm{He}(Z=۲)$ و $\mathrm{Al}(Z=۱۳)$ به ازای چگالی $\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^۳}\right)=۱۰۰$ ° بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش تبادلی.



شکل ۱۰. نمودار مقادیر انرژی برحسب تغییرات چگالی پلاسما $\left(\frac{\mathrm{gr}}{\mathrm{cm}^۳}\right)=$ ° برای Al و He به ازای دمای $T=۱۰\mathrm{KeV}$ بدون در نظر گرفتن برهم‌کنش تبادلی.

از این نمودار می‌توان نتیجه گرفت که در ناحیهٔ چگالی‌های پایین، اثرات تبادلی الکترونی بر انرژی پلاسما با افزایش عدد اتمی افزایش می‌یابد و مقدار این تصحیحات برای ناحیهٔ چگالی بالا در پلاسما به مقدار حدی معینی می‌رسد. همچنین در شکل ۱۰ تغییرات انرژی داخلی برحسب چگالی پلاسما برای Al و He در دمای $T=۱۰\mathrm{KeV}$ بدون لحاظ کردن اثرات تبادلی ارائه شده است.

لازم به ذکر است که با در دست داشتن مقادیر تصحیحات عنصر $(Z_۱,A_۱)$ می‌توان تصحیحات مربوط به هر عنصر مورد نظر دیگر $(Z_۲,A_۲)$ را نیز براساس ضرائب تبدیل به شکل زیر محاسبه نمود

$$\Delta P \to \left(\frac{Z_۲}{Z_۱}\right)^{۸/۳} \Delta P \ , \ \Delta E \to \left(\frac{Z_۲}{Z_۱}\right)^{۵/۳} \Delta E \ .$$

۴. نتیجه‌گیری

با توجه به توضیحات فوق به عنوان نتیجهٔ کلی می‌توان بیان کرد

www.SID.ir

Archive of SID

که تصحیحات ناشی از برهم‌کنش‌های تبادلی برای فشار و انرژی داخلی پلاسمای داغ و چگال، به تغییرات مقادیر چگالی، دما و همچنین عدد اتمی گاز وابسته می‌باشد به طوری که با افزایش دما مقادیر این تصحیحات قابل توجه و غیر قابل چشم‌پوشی می‌باشد. محاسبهٔ بزرگی این تصحیحات در بازه‌های مختلف برای دما و چگالی پلاسما در مطالعهٔ چگونگی رفتار ترمودینامیکی پلاسمای داغ و چگال نقش مهمی را ایفا می‌کند.

مراجع

1. S Eliezer, A Ghatak, and H Hora, "*Fundamental of Equation of State*", World Scientific (2002).
2. S X Hu *et al., Phys. Rev. Lett.* **100** (2008) 185003.
3. T Guillot, *Annu. Rev. Earth Planet Sci.* **33** (2005) 493.
4. J J Fortney *et al*., *Phys. Plasmas* **16** (2009) 041003.
5. P Dufour *et al*., *Nature* **450** (2007) 522.
6. J D Lindl *et al*., *Phys. Plasmas* **11** (2004) 339.
7. S X Hu *et al*., *Phys. Rev*. *Lett*. **104** (2010) 235003.
8. ح حسین‌خانی، م فریدفر، ن عیدیان، ا ح اسماعیلیان عراقی، «*معادلات حالت پلاسمای داغ و چگال در گداخت اینرسی بر اساس مدل توماس- فرمی*»، مقاله نامهٔ کنفرانس فیزیک ایران (۱۳۹۱) ۱۶۵۱.
9. R M More in, "*Laser Plasma Interactions"*, Proceedings of the 29th Scottish Universities Summer School in Physics, edited by M. B.Hooper, Camelot, Southampton (1986).
10. B Ya Zel'dovich and Yu P Raizer, "*Physics of Shock Waves and High Temperature Hydrodynamics Phenomena*", Academic Press, New York (1966).
11. A F Nikiforov, V G Novikov, and V B Uvarov, "*Quantum Statistical Models of Hot Dense Matter*", Birkhauser Verlag, Basel, Switzerland (2005).
12. B F Rozsnyai, *Phys. Rev*. A **53** (1972) 1137.
13. N N Kalitkin and L V Kuzmina, "*Tables of Thermodynamic Functions of Matter at High Energy Densities*", Keldysh Institute of Applied Mathematics Russian Academy of Sciences, Moscow (1975).
14. D A.Kirzhnits, *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics* **8**, 6 (1959) 1081.
15. S K Godunov, and V S Ryabenkii, "*The Theory of Difference Schemes – An Introduction to the Underlying Theory*", NorthHolland, Amsterdam (1987).
16. A A Samarskii, and A V Gulin, "*Numerical Methods*", Nauka, Moscow (1989).

www.SID.ir