

LTEプラズマ中での非average-atom モデルによるイオンの電荷分布

奈良女子大学 人間文化研究科
谷本曜子 清川修二 香川貴司

目次

1. 序論
2. 理論
3. AIプラズマの計算結果
4. 考察
5. まとめ

1. 序論

LTEプラズマ中のopacityの計算にはイオンの電荷分布が必要

整数個の各電離度の電子配置の確率分布は2項分布で求める。

しかし、この2項分布モデルの妥当性に関しては十分に検討されていない。

有限温度密度汎関数法を用いた統計的モデルを解いて、2項分布モデルの妥当性について検討する必要がある。

2 理論

LTEプラズマ中のイオンの電荷分布

束縛電子数 N 、量子状態 s のイオンの存在確率

$$\left\{ \begin{array}{l} W(E_s(N), N) = \frac{1}{Z_G} G_s(N) e^{-\beta\{E_s(N) - \mu N\}} \\ Z_G = 1 + \sum_{N=1}^Z \sum_s G_s(N) e^{-\beta\{E_s(N) - \mu N\}} \end{array} \right.$$

イオンの電荷分布

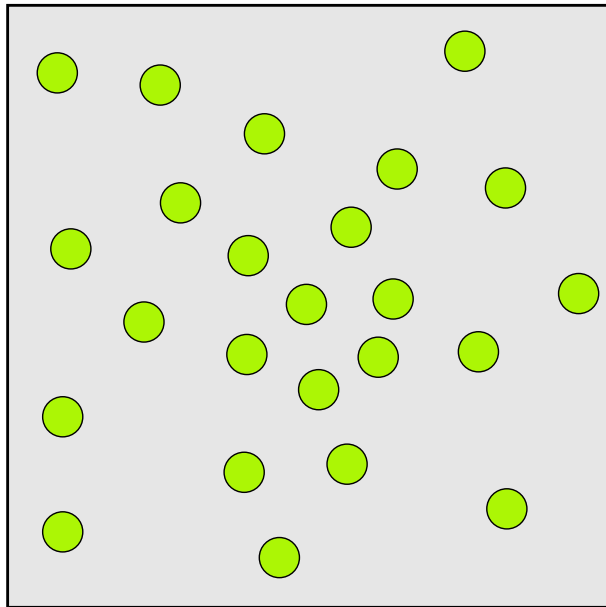
Charge state Q のイオンの存在割合

$$P(Q) = \sum_s W(E_s(Z - Q), Z - Q)$$

$E_s(N)$ を求めるには **プラズマ中のイオンの平均的電子状態が必要**

- | | | | |
|-----------------------|----------|---|-----------------------------------|
| 1. Chemical potential | μ | } | ① FTDFT
② AA モデル |
| 2. イオンの平均電離度 | Z^* | | |
| 3. イオンの空間配置 | g_{ii} | | |

① 有限温度密度汎関数法 (FTDFT)



プラズマのモデル

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r) \right) \psi_{nl}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{nl}\psi_{nl}(\mathbf{r})$$

$$V(r) = -\frac{Z}{r} + \int \frac{\rho_b(\mathbf{r}') - Q_s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + v_{xc}$$

$$\rho_b(\mathbf{r}) = 2 \sum_{nl} f(\varepsilon_{nl}) |\psi_{nl}(\mathbf{r})|^2$$

$$Q_s(\mathbf{r}) = Z\rho_{ion}g_{ii}(\mathbf{r}) - \rho_{ion} \int \rho_b(\mathbf{r} - \mathbf{R})g_{ii}(\mathbf{R})d\mathbf{R} - \rho_c$$

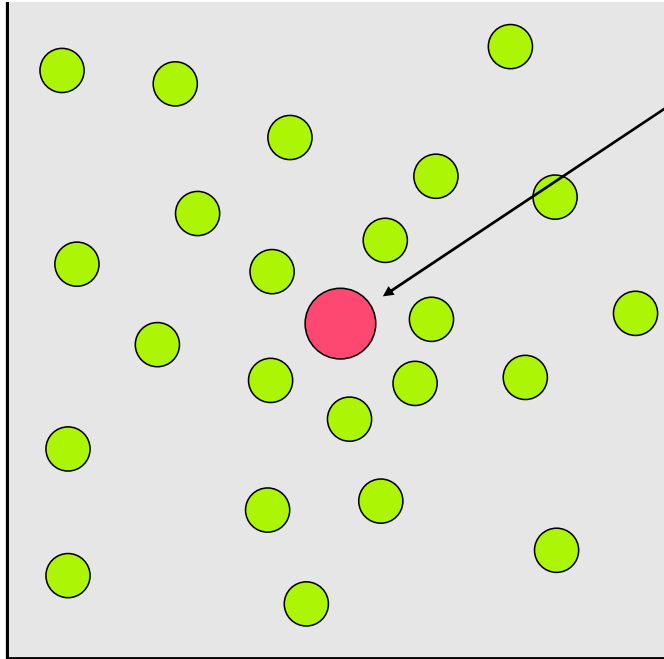
$$\rho_c = Z^*\rho_{ion} = \frac{1}{\pi^2} \int \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon$$

電荷中性の条件 $Z = 2 \sum_{nl} f(\varepsilon_{nl}) + Z^*$

イオンの動径分布関数 $g_{ii}(r)$

HNC近似で求める

$E_s(N)$ を求める



整数個の電子配置を持ったイオン

$$V_{\text{外場}}(r) = -\frac{Z}{r} - \int \frac{Q_s(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = E_s(N)\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_i^2} + V_{\text{外場}}(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{i,j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

整数電子配置

$$1s^{n_1} 2s^{n_2} 2p^{n_3} 3s^{n_4} 3p^{n_5} 3d^{n_6} \dots$$

$N = 13$:	$(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6, n_7, \dots)$ $(2, 2, 6, 2, 1, 0, 0, \dots)$ $(2, 2, 6, 2, 0, 1, 0, \dots)$	}	電子配置の総数 31万6532通り
		\vdots		
$N = 12$:	$(2, 2, 6, 2, 0, 0, 0, \dots)$ $(2, 2, 6, 1, 1, 0, 0, \dots)$		
		\vdots		
$N = 1$:	$(1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots)$		
		\vdots		

$$E_s(N) \rightarrow E(n_1, n_2, \dots)$$

$$E(n_1, n_2, \dots) = \sum n_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum n_i \langle \varphi_i | [v_e(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} v_{xc}(\mathbf{r})] | \varphi_i \rangle$$

$$N = \sum_i n_i$$

多重度 $G_s(N) = \prod_i \binom{g_i}{n_i}$

g_i : 軌道 i の最大占有電子数

$$W(E_s(n), N) = W(n_1, n_2, \dots) = \frac{1}{Z_G} G_s(N) e^{-\beta(E - \mu N)}$$

② AA モデル

2項分布による存在確率

$$W_{\text{bin}}(\{n\}) = \prod_i \binom{g_i}{n_i} f_i^{n_i} (1 - f_i)^{g_i - n_i}$$

$$f_i = \frac{n_i}{g_i}$$

確率保存

$$\sum_{n_1=0}^{g_1} \sum_{n_2=0}^{g_2} \sum_{n_3=0}^{g_3} \cdots W_{\text{bin}}(\{n\}) = 1$$

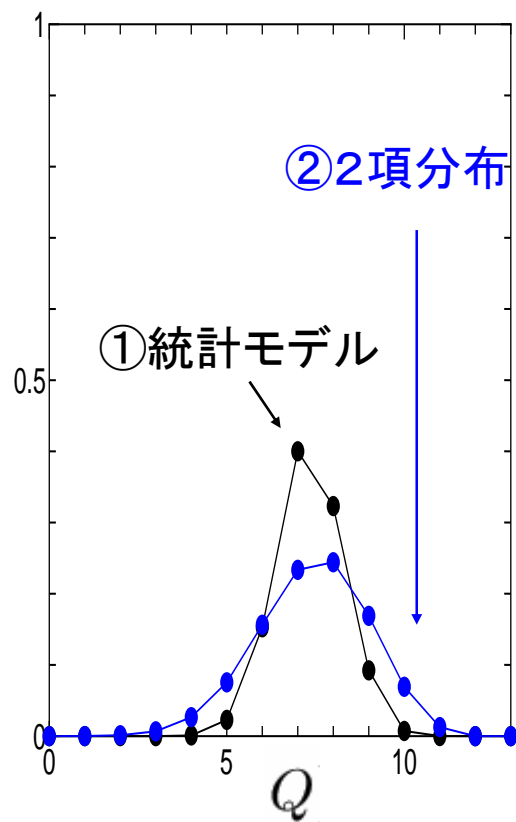
3. Alプラズマの計算結果

プラズマ温度	50eV	プラズマ密度 / 固体密度	0.01
	100eV		0.1
	200eV		1

$$\text{Al 固体密度} = 6.004 \times 10^{22} \text{cm}^{-3}$$

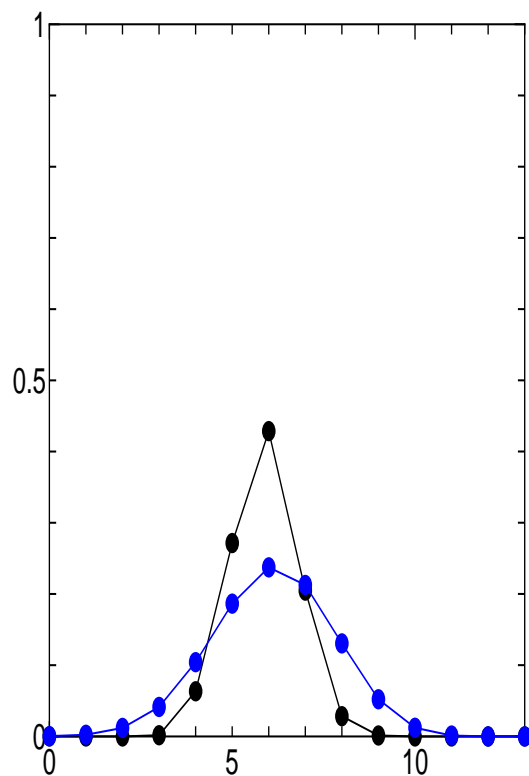
電荷分布 ($T=50\text{eV}$)

$P(Q)$



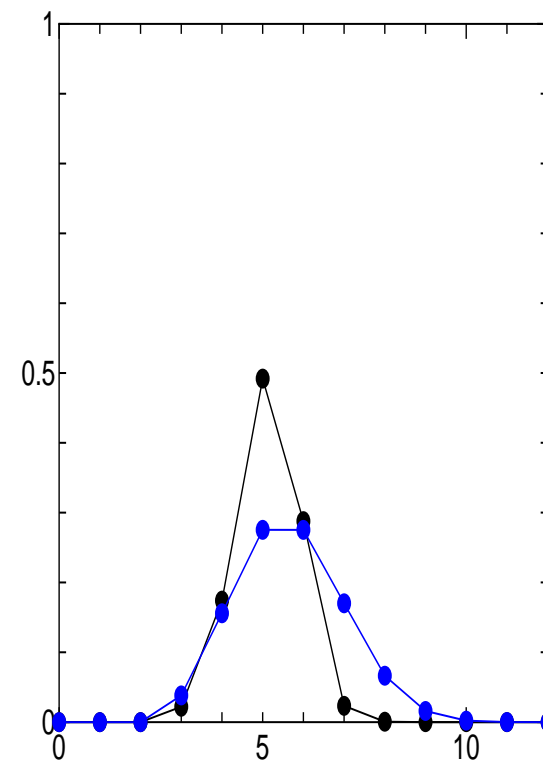
0.01固体密度

$$Z^* = 7.4$$



0.1固体密度

$$Z^* = 6.1$$

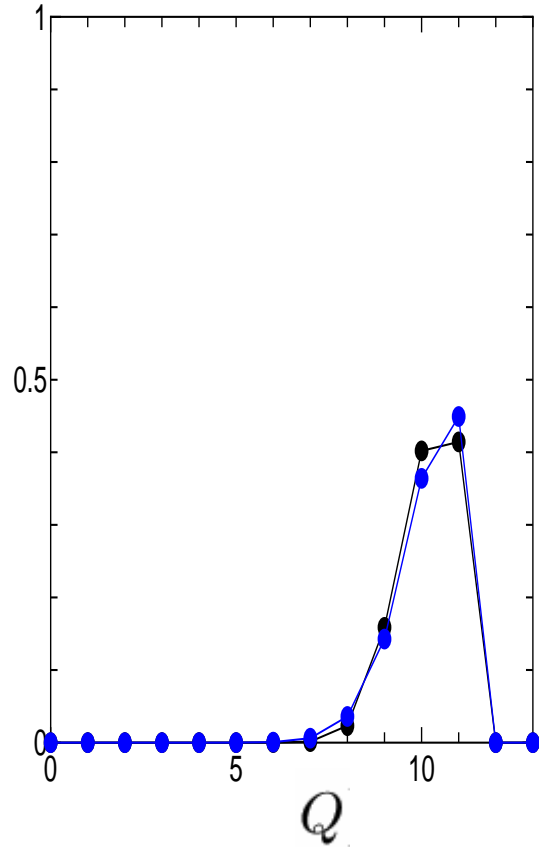


固体密度

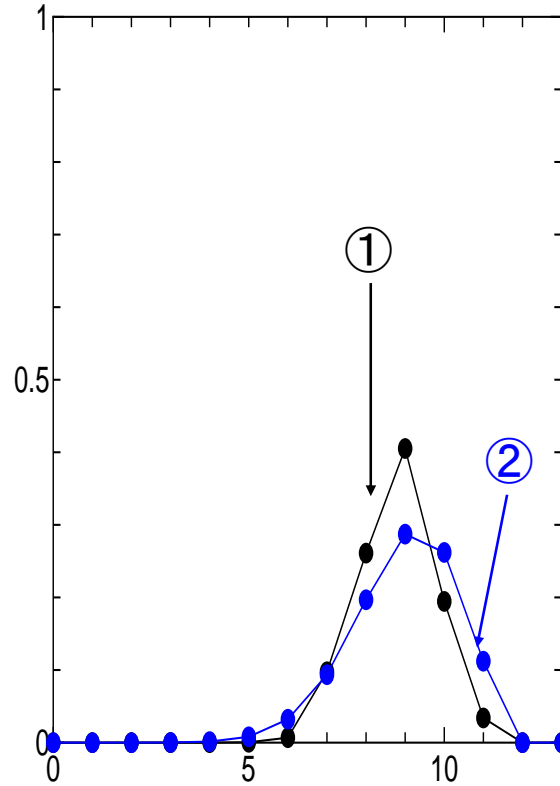
$$Z^* = 5.7$$

電荷分布 (T=100eV)

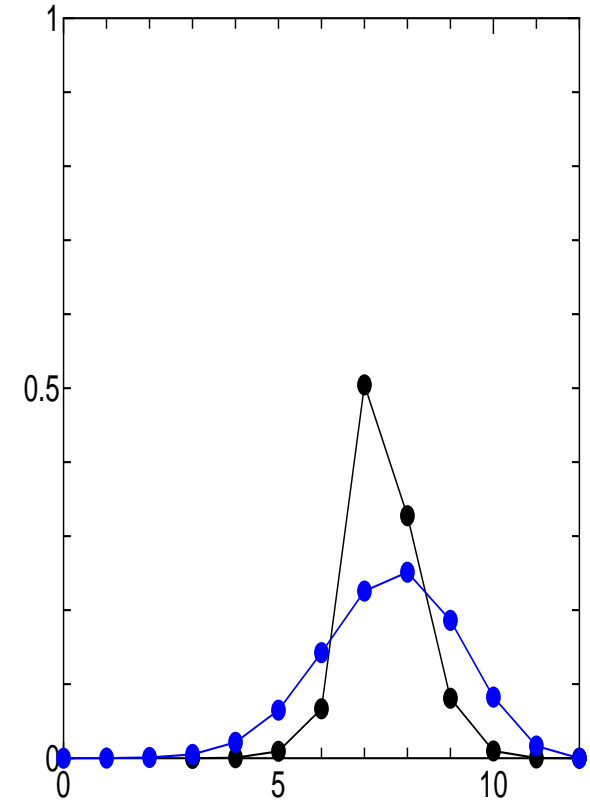
$P(Q)$



0.01固体密度
 $Z^* = 10.2$



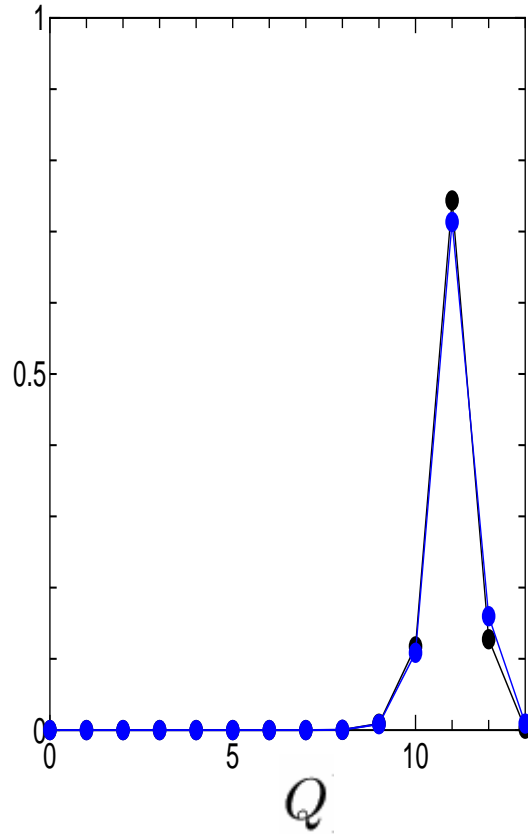
0.1固体密度
 $Z^* = 8.9$



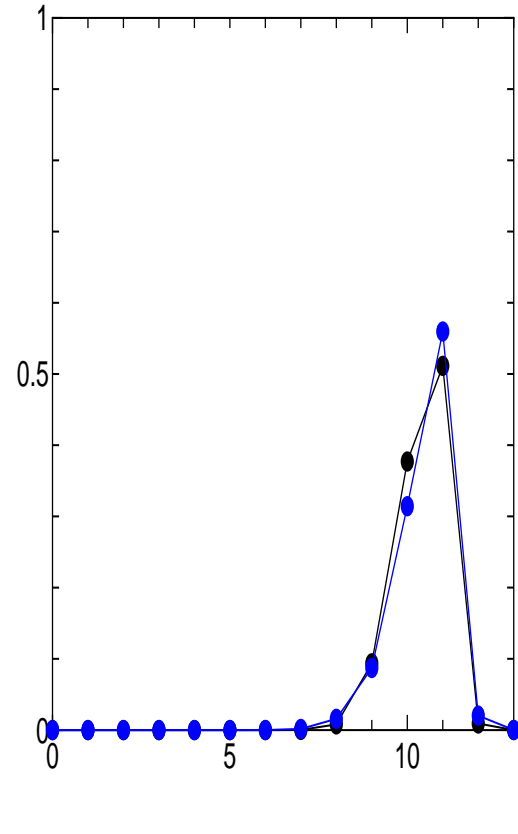
固体密度
 $Z^* = 7.6$

電荷分布 (T=200eV)

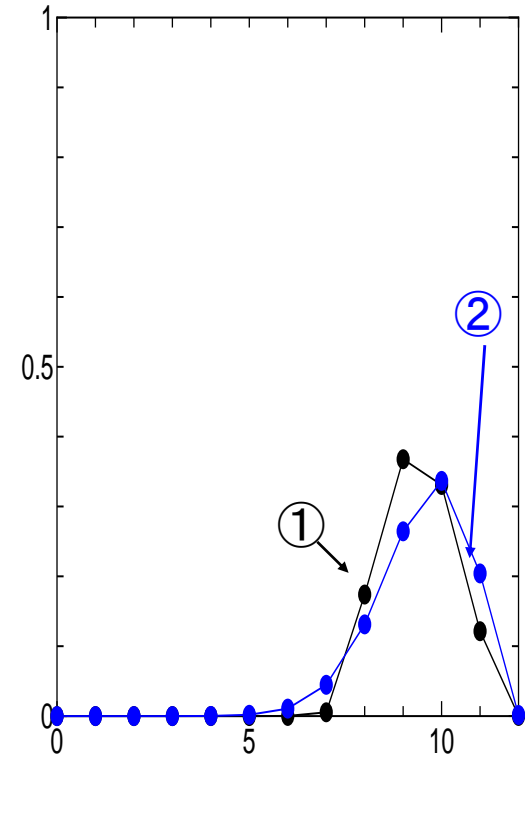
$P(Q)$



0.01固体密度
 $Z^* = 11.0$



0.1固体密度
 $Z^* = 10.5$



固体密度
 $Z^* = 9.5$

4. 考察

(二項分布モデルで電荷分布が広がる理由)

①FTDFT
$$E(n_1, n_2, \dots) = \sum n_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum n_i \langle \varphi_i | [v_e(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} v_{xc}(\mathbf{r})] | \varphi_i \rangle$$

②AA
$$E_s(N) = \sum_i n_i \varepsilon_i$$
 独立粒子模型

$$W(E_s(n), N) = W(n_1, n_2, \dots) = \frac{1}{Z_G} G_s(N) e^{-\beta(E - \mu N)}$$

②の方は、電子電子相互作用の項の計算はない。

①統計モデルと②2項分布モデルを使った
AIプラズマの計算結果より

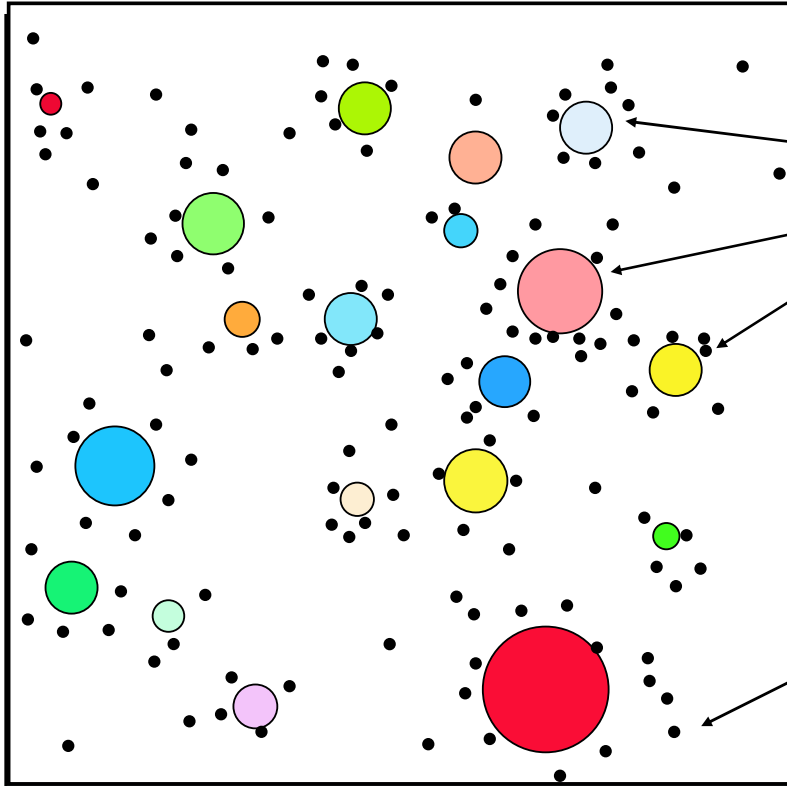
現実のプラズマを記述するのは②のモデルは電子電子相互作用が抜けているのでよくない事が分かった。

Opacity の計算で2項分布モデル？

→ ①FTDFTの方法で求める必要がある。

5. まとめ

1. AI プラズマの電荷分布の計算
(①統計的モデル と ②2項分布モデル)
2. AIプラズマの計算結果から、高温の時は
①と②は一致してるが、他は違いがある。
3. Opacityの計算は統計的モデルを使う必要がある。



種々の電離度、励起状態
にあるイオン

連続状態の電子