

УДК 523.947

Моделирование диффузии химических элементов в недрах Солнца

А.Б. Горшков, В.А. Батулин, С.В. Аюков

ГАИШ МГУ им. М.В. Ломоносова, Россия

Поступила в редакцию 31 декабря 2005 г.

Аннотация. В работе рассмотрена диффузия химических элементов как процесс микроскопического перераспределения вещества с целью определения ее влияния на профиль химического состава современного Солнца. Были исследованы диффузия гелия в плазменной смеси водорода и гелия и диффузия одиннадцати наиболее распространенных тяжелых элементов на фоне диффузионных потоков водорода и гелия. Получены оценки изменения содержания химических элементов в конвективной оболочке. Рассмотрены особенности формирования профиля содержания тяжелых элементов в результате диффузионных процессов.

Ключевые слова: Солнце, внутреннее строение, осаждение, диффузия

1 Введение

Под термином “диффузия” будем понимать процессы, приводящие к появлению микроскопических потоков вещества в системе. Причиной возникновения процесса перераспределения частиц в смеси является отсутствие термодинамического равновесия между частями системы, и процесс протекает в направлении восстановления такого равновесия. Например, разность содержания вещества вызывает поток концентрационной диффузии, стремящейся выровнять концентрацию.

При отсутствии равновесия по какому-то параметру (содержание компонентов, температура, давление и т.п.) диффузионная сила (зависящая от соответствующего градиента, например $\nabla \ln P$) по разному действует на частицы разных сортов. Диффузионные потоки не могут вести к смещению центра масс системы. Как результат, потоки гелия J_{He} и водорода J_H связаны соотношением масс компонент, то есть $J_H m_H + J_{He} m_{He} = 0$. Аналогичный баланс должен выполняться в отношении заряда. Поэтому в плазме диффузионное перераспределение компонент возможно только в трехкомпонентной системе – например, водород, гелий и электроны.

К диффузии не относятся гидродинамические потоки вещества как целого, с перемещением центра масс выделенного объема. Наличие таких потоков (например, конвекция) может существенно влиять на процессы диффузии, но в нашей работе мы используем предположение о полном усреднении диффузионных потоков в конвективной зоне. Более детально это предположение описано ниже. Основной причиной нарушения термодинамического равновесия между различными частями в звезде являются силы гравитации, приводящие к значительному градиенту давления. Наличие градиента давления ведет к осаждению тяжелых элементов на фоне легких (водорода). Отвлекаясь от влияния заряда частиц смеси, бародиффузию можно представить как “осаждение”

более тяжелых элементов вниз, к центру звезды, и “всплывание” более легких элементов вверх, к внешним слоям. Однако наличие у частиц заряда может существенно замедлить диффузию, и этот эффект будет рассмотрен ниже при сравнении скоростей диффузии тяжелых элементов.

Связанным с установлением градиента давления является градиент температуры, обусловленный нагревом сжимающегося вещества и малой теплопроводностью внутри звезды. Градиент температуры характеризует отклонение от равновесия и ведет к диффузии (т.н. термодиффузия). Его действие в рамках используемых коэффициентов в уравнении диффузии (Мишад, Профитт, 1993) также ведет к осаждению более тяжелых элементов к центру звезды.

Основной эволюционный процесс в звездах – термоядерные превращения водорода в гелий – меняет концентрацию элементов в центральных частях звезды. Как следствие, возникают условия для концентрационной диффузии, стремящейся выровнять концентрацию элементов. Этот механизм действует в направлении, обратном осаждению гелия – содержание водорода увеличивается в центральных областях. В рамках линейного приближения неравновесной термодинамики (Агеев, 2001) диффузионный поток вещества пропорционален диффузионной силе. Из перечисленных выше факторов наибольшим является градиент давления, а наименьшим – концентрации. Поток концентрационной диффузии оказывается очень малым на фоне бародиффузионного осаждения. Суммарное действие диффузии разных видов в процессе эволюции Солнца и составляет предмет этой работы. Для полноты картины упомянем еще фотодиффузию (или радиационное ускорение) – процесс, возникающий из-за передачи импульса при поглощении излучения веществом и разности коэффициентов поглощения разных элементов. В нашей работе данный эффект не рассматривается, хотя работы других авторов показывают (Туркот и др., 1998), что для определенных элементов, активно участвующих в поглощении (например, железа), эффект может быть вполне заметным.

Общее математическое уравнение нестационарной диффузии вытекает из уравнения сохранения вещества данного сорта:

$$\frac{dX_i}{dt} = \nabla \cdot J_i. \quad (1)$$

Описанные выше физические предположения о процессах, вызывающих диффузионные потоки J_i , в рамках линейного приближения ведут к выражению для потоков в виде

$$J_i = -D_n \nabla x_i - D_T \nabla (\ln T) - D_P \nabla (\ln P), \quad (2)$$

которое нужно подставить в уравнение 1. Детальные выражения для коэффициентов диффузии всех видов D_n , D_T , D_P приведены ниже. Мы использовали приближение линейного уравнения в частных производных. При этом коэффициенты диффузии не содержат зависимости от массовой доли $X_i(t, r)$, которая получается при решении данного уравнения. В общем случае это не так, поскольку коэффициенты определяются физическими условиями в каждой точке модели, а общее строение модели определяется профилем химического состава. Однако возвращаясь к предположению, что в условиях Солнца скорость диффузии элементов мала по сравнению с эволюционным изменением химического состава в процессе ядерного горения, мы использовали предположение о “замораживании” коэффициентов диффузии. Это значит, что коэффициенты рассчитываются на основании эволюционной последовательности моделей, которые не зависят от процессов диффузии. При этом все коэффициенты зависят от времени, координаты и содержания водорода X в модели, но не зависят от решения уравнения диффузии. Такую процедуру можно уточнять в процессе итераций, но основные характеристики влияния диффузии на эволюцию получаются уже в первом приближении. В уравнении 1 массовая доля частиц сорта i в смеси X_i является неизвестной, а диффузионный поток выражаем через скорость потока частиц $J_i = \rho V_i X_i$. При решении дифференциального уравнения использовались следующие начальные и граничные условия. Начальный профиль $X_i(t = 0) = X_{i0}$ не зависит от радиуса. Граничные условия соответствуют условиям нулевого потока в центре и на поверхности $J_i(r = 0) = J_i(r = R) = 0$.

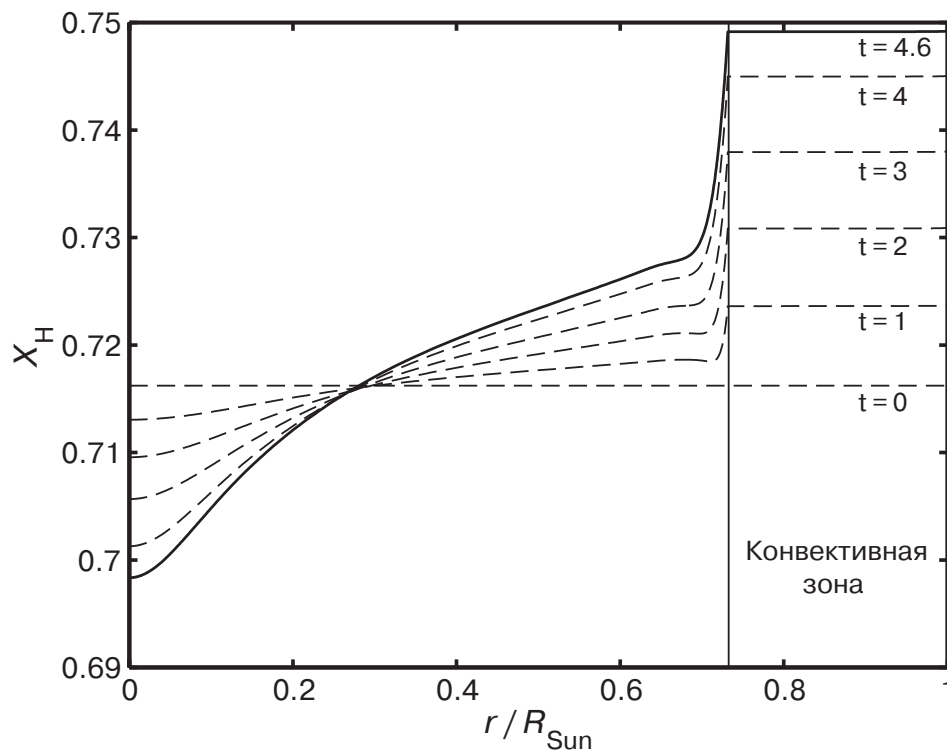


Рис. 1. Эволюция профиля содержания водорода со временем (в млрд. лет) как результат диффузионных процессов

2 Приближения задачи о диффузионных потоках

Для получения коэффициентов в уравнении диффузии использовалась эволюционная последовательность моделей, рассчитанная без учета диффузии (Аюков и др. 2004). Более подробно процедура расчета моделей изложена в работе Аюков и др., 2006. Внутри Солнца нужно выделять две области, отличающиеся законом теплопроводности – внешнюю конвективную зону, занимающую 30% оболочки по радиусу, и ядро, где перенос энергии происходит лучистым образом. Граница между этими областями характеризуется разрывом второй производной температуры. Внутри конвективной зоны происходит быстрое перемешивание вещества. Для описания диффузии в конвективной оболочке использовалось предположение об “усреднении диффузионных потоков”. Численная реализация такого предположения выполняется в уравнении диффузии, полагая коэффициент концентрационной диффузии D_X равным достаточно большой величине. Таким образом, зависимость коэффициента диффузии от радиуса оказывается разрывной функцией. Большой коэффициент диффузии ведет к тому, что градиент химического состава в конвективной зоне равен нулю $\nabla X_i(r > r_{CZ}) = 0$. Химический состав в конвективной зоне характеризуется одним значением, зависящим только от времени $X_i^{CZ}(t)$. Диффузия ведет к снижению содержания гелия, и величина $\Delta Y^{CZ} = Y^{CZ}(4.6) - Y^{CZ}(0)$ в современном Солнце, по сравнению с начальным, есть важнейший результат как эволюционных, так и диффузионных расчетов. Аналогичные результаты общего осаднения в конвективной зоне были получены в отношении тяжелых элементов. Отметим, что коэффициенты бародиффузии вычисляются в конвективной зоне обычным путем, несмотря на перемешивание. Именно значения коэффициентов D_P и D_T определяют общий результат осаднения элементов из конвективной зоны. Полученные оценки являются прямым результатом выбранной численной конечно-разностной схемы. Для подтверждения корректности выбранной модели, а также для оценки точности, полученные результаты сравнивались с ре-

зультатами интегральной оценки бародиффузии (подробнее см. Аюков и др. 2006), а также с экспериментами по расчетам осаждения без учета перемешивания в конвективной зоне вообще. Сравнение подтверждает точность выбранной нами модели.

В расчетах предполагалось, что все рассматриваемые элементы полностью ионизованы. Это справедливо в конвективной зоне для легких элементов вплоть до Ne. Однако для железа ситуация сложнее, и даже в центре его ионизация может быть неполной. В подобных случаях более подходящим было бы рассмотрение диффузии с учетом изменения степени ионизации элемента с глубиной.

3 Диффузия в смеси водород-гелий

Выражение для скорости диффузии водорода V_H использовано из работы (Мишад, Профитт 1993):

$$V_H = -\frac{BT^{5/2}}{\rho \ln \Lambda (0.7 + 0.3X)} \left[\left(\frac{5}{4} + \frac{9}{8} \frac{d \ln T}{d \ln P} \right) (1 - X) \frac{d \ln P}{dr} + \frac{(3 + X)}{(1 + X)(3 + 5X)} \frac{d \ln X_H}{dr} \right]. \quad (3)$$

Обратим внимание на различие величин X и X_H в этом выражении. X означает содержание водорода, взятое из модели, а X_H – содержание водорода, вычисленное в процессе решения задачи диффузии.

Выражение для коэффициента B и кулоновского логарифма $\ln \Lambda$ взяты из (Мишад, Профитт 1993).

Выражение (3) описывает бародиффузионный дрейф более тяжелого гелия к центру Солнца (члены, пропорциональные градиенту давления $\nabla \ln P$) с учетом поправки на термодиффузию. Влияние термодиффузии представлено слагаемым, пропорциональным градиенту температуры. В соответствии с выражением 3, термодиффузия усиливает бародиффузию на величину примерно 30% общего диффузионного потока. Слагаемое, пропорциональное градиенту содержания водорода, соответствует концентрационной диффузии и описывает поток в противоположную сторону (водород стремится к центру), хотя его доля не слишком велика в условиях Солнца.

Результаты решения уравнений диффузии для эволюции профиля водорода представлены на рис. 1 как профили содержания водорода в последовательные моменты времени. Обратим внимание, что здесь не показано влияние на содержание водорода реакции нуклеосинтеза. Однако в расчетах это влияние учитывалось добавлением соответствующего члена в правую часть уравнения 1. Из графика видно, что главный эффект состоит в накоплении со временем водорода во внешних областях Солнца. За время эволюции его содержание в центре в результате диффузии снизилось: $\Delta X_H^c = -0.018$, а в конвективной зоне выросло: $\Delta X_H^{CZ} = 0.033$. Для гелия эти величины следует брать с обратным знаком. Интересной особенностью полученных профилей является наличие точки, где содержание практически не меняется со временем. Эта точка находится на глубине $r/R_{Sun} \simeq 0.3$ и соответствует максимуму функции потока $J_i(r)$ (см. рис. в докладе Аюков и др. 2006. Там же обсуждается формирование “скачка” содержания под основанием конвективной зоны).

Принципиальным результатом данных расчетов является именно изменение содержания в конвективной оболочке. Строение лучистой зоны и ядра позволяет оценивать скорость диффузии достаточно уверенно, и, кроме того, характерные величины диффузионного изменения в глубоких слоях относительно невелики. Полученные нами величины диффузионного осаждения гелия из конвективной зоны находятся в разумном согласии с результатами других авторов (таблица со сравнительными данными приведена в докладе Аюков и др. 2006). Это доказывает надежность выбранного приближения для линейного уравнения диффузии, то есть при отсутствии обратного влияния диффузии на модель, оценка эффекта получается с разумной точностью (в пределах 10%).

4 Скорость диффузии тяжелых элементов

Мы рассчитали диффузию одиннадцати наиболее обильных тяжелых элементов от кислорода до кальция. Решение уравнения диффузии проводилось отдельно для каждого элемента в предположении, что а) он является малой примесью ко взаимно диффундирующей смеси H + He

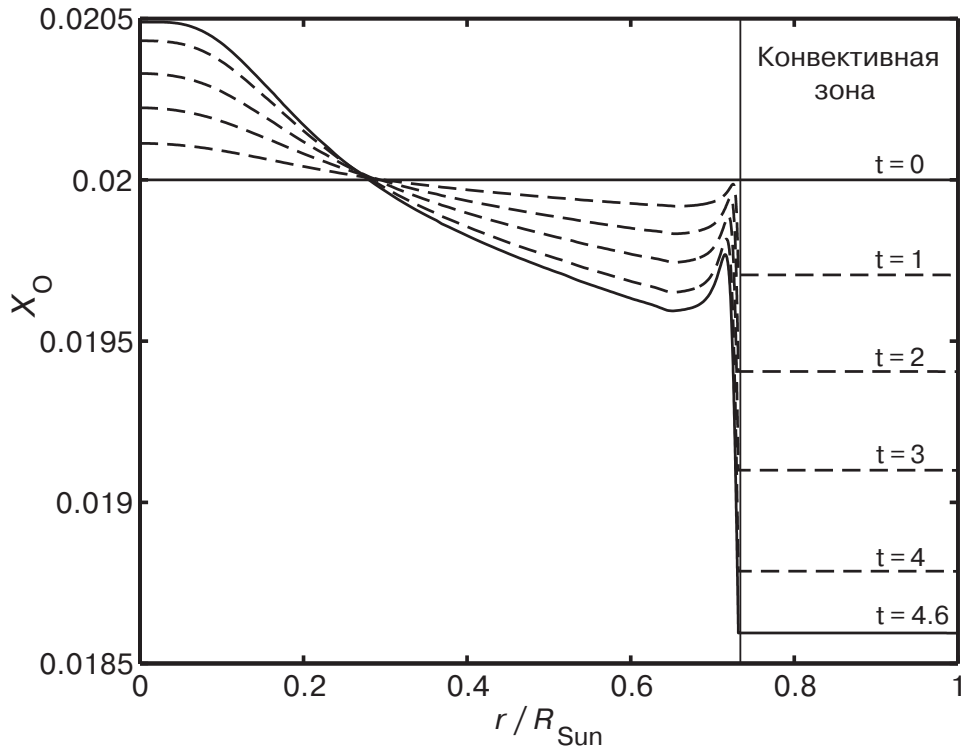


Рис. 2. Изменение содержания кислорода вследствие диффузионных процессов.

и б) начальное содержание элемента равно 0.02 по массе. Характеристики изучаемых элементов (заряд, масса и обилие на Солнце) приведены в таблице.

Таблица 1. Тяжелые элементы, для которых рассчитывалась скорость осаждения из конвективной зоны

	O	C	Ne	N	Si	Mg	Fe	S	Ar	Al	Ca
Z_i	8	6	10	7	14	12	26	16	18	13	20
A_i	16	12	20	14	28	24	56	32	40	27	40
$12 + \ln(X_i/X)$	8.8	8.5	8.0	7.9	7.60	7.57	7.52	7.19	6.6	6.4	6.32

Выражение для скорости диффузии тяжелых элементов имеет вид

$$V_i = -\frac{2BT^{5/2}}{\sqrt{5}\rho Z_i^2} \left[\frac{\frac{d}{dr} \left\{ \ln \left[\frac{X_i}{5X+3} \left(\frac{1+X}{5X+3} \right)^{Z_i} \right] \right\} + [1 + Z_i - A_i \left(\frac{5X+3}{4} \right)] \frac{d \ln P}{dr}}{X (\sqrt{A_{ix}} C_{ix} - \sqrt{A_{iy}} C_{iy}) + \sqrt{A_{iy}} C_{iy}} \right] + \frac{0.54BT^{5/2} (4.75X + 2.25)}{\rho (\ln \Lambda_{xy} + 5)} \frac{d \ln T}{dr} + XV_H \frac{\sqrt{A_{ix}} C_{ix} - \sqrt{A_{iy}} C_{iy}}{X (\sqrt{A_{ix}} C_{ix} - \sqrt{A_{iy}} C_{iy}) + \sqrt{A_{iy}} C_{iy}}, \quad (4)$$

где A_{ix} и C_{ix} – соответственно, приведенная атомная масса и частота столкновений i -го элемента с протонами, A_{iy} и C_{iy} – то же самое для i -го элемента и гелия. По аналогии с описанием формулы (3), первое слагаемое соответствует бародиффузии тяжелых элементов на фоне ионизованной смеси

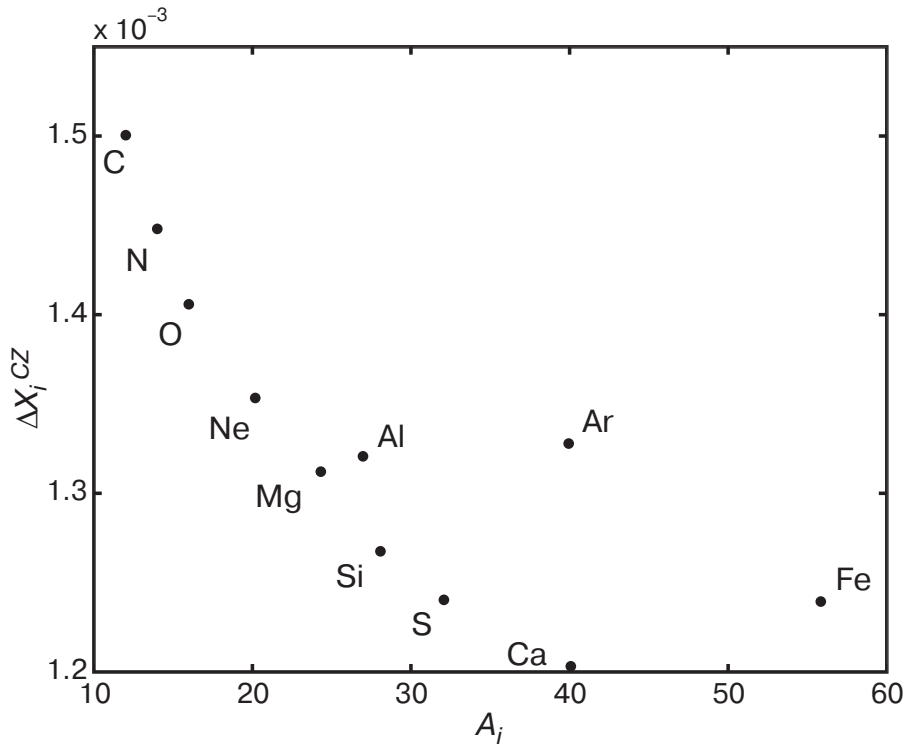


Рис. 3. Величина осаждения тяжелого элемента из конвективной зоны.

водорода и гелия. Последний член описывает эффект увлечения ионов диффузионным потоком водорода. И наконец, второе слагаемое описывает влияние термодиффузии элементов. Обратим внимание, что в коэффициент бародиффузии (множитель перед градиентом давления) заряд Z_i и масса иона A_i входят с разными знаками. Это значит, что осаждение элементов к центру под действием гравитации замедляется с увеличением заряда иона. Этот эффект можно трактовать как следствие сохранения электрической нейтральности среды – если заряженный ион движется вниз, в том же направлении увлекаются и электроны (в количестве, равном заряду иона). Результатом такого увлечения является увеличение эффективного сечения взаимодействия, что ведет к торможению диффузионного осаждения. Другими словами, сильно ионизованный ион оседает медленнее, чем слабоионизованный.

5 Диффузия кислорода в смеси водород-гелий

Расчеты показали, что все тяжелые элементы диффундируют к центру Солнца, и эволюция их профилей отличается незначительно. Результаты моделирования диффузии кислорода в смеси водород+гелий показаны на рисунке 2. При начальном содержании элемента $X_O(t=0) = 0.02$, диффузионное “оседание” приводит к тому, что в центре содержание кислорода увеличивается на $\Delta X_O^C = 0.0005$, а в конвективной зоне уменьшается на $\Delta X_O^{CZ} = -0.0014$.

6 Осаждение тяжелых элементов из конвективной зоны

Проведя расчеты диффузии для 11 тяжелых элементов с одинаковыми начальными условиями (однородное распределение по радиусу, содержание равно 0.02 по массе), мы получили величину осаждения этих элементов из конвективной зоны.

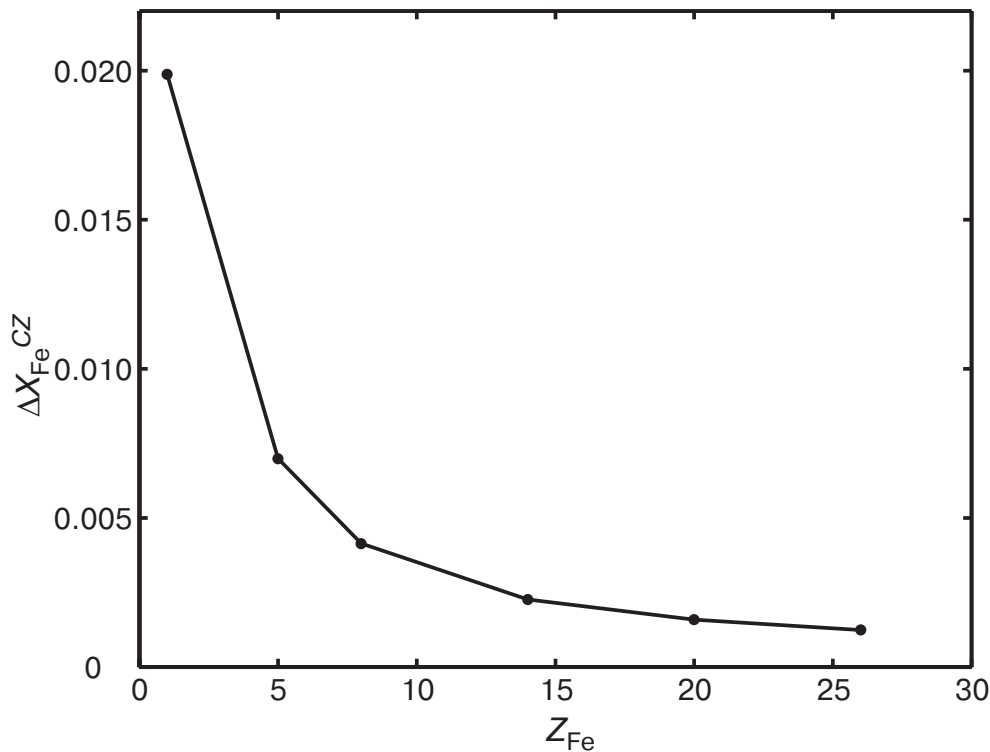


Рис. 4. Осаждение железа из конвективной зоны в предположении его частичной ионизации

Заметно, что элементы на графике разбились на две группы. Первая (C, N, O, Ne, Mg, Si, S, Ca) образовала монотонную кривую, в которой скорость оседания элементов падает с увеличением их атомной массы. Эта общая кривая следует зависимости от заряда, описываемой множителем Z_i^{-2} в 4. Элементы второй группы (Al, Ar, Fe) осаждаются из конвективной зоны явно быстрее, чем элементы первой группы с похожими массами (можно сравнить пары Al-Si и Ar-Ca). Нетрудно заметить, что в первую группу входят элементы с отношением масса-заряд, точно равным двум, в то время как для элементов второй группы это отношение больше двух. Различие для этих групп объясняется влиянием множителя перед градиентом давления в 4.

Рассмотрим влияние заряда иона при условии постоянной массы на примере железа. Будем менять его предполагаемую степень ионизации (по всей модели) и рассчитывать соответствующее оседание элемента из конвективной зоны. Результаты таких расчетов приведены на рис. 4. В результате получаем, что при одинаковой массе быстрее диффундирует ион с меньшим зарядом.

В отношении диффузии тяжелых элементов можно сказать следующее. Во-первых, с увеличением заряда скорость осаднения падает, причем при малых зарядах она падает наиболее быстро. Поэтому относительная доля осажденных тяжелых элементов несколько меньше, чем для водорода. Во-вторых, для некоторых элементов из-за специфики отношения A/Z возможны существенные отклонения от “общей” зависимости скорости осаднения от заряда, т.е. при достаточно большой скорости диффузии возможно перераспределение относительных содержаний тяжелых элементов. В-третьих, если определяющим фактором диффузии является бародиффузия, доля осажденных из конвективной зоны тяжелых элементов является довольно малой и вряд ли существенно сказывается на модели. Это связано со значительным торможением диффузии сильно ионизированных элементов.

7 Выводы

Основные выводы следующие.

1) Осаждение элементов из конвективной зоны определяется строением самой конвективной зоны, в частности, положением ее границы. Диффузионный профиль в лучистом ядре не зависит от осаждения из конвективной зоны, поскольку скорость распространения диффузионного возмущения весьма мала.

2) Главным фактором диффузии является бародиффузия, которая определяет общий характер дрейфа тяжелых элементов к центру. Термодиффузия приводит к изменениям оценки до 30%.

3) Изменение химического состава в конвективной зоне ведет к появлению разрыва химического состава под конвективной зоной. Этот разрыв может сглаживаться в той или иной степени на расстояниях порядка толщины области полуконвекции. Количественные оценки для осаждения элементов из конвективной зоны (в модели полного усреднения) $\Delta X_H^{CZ} = 0.033$. Содержание гелия в конвективной зоне уменьшается по сравнению с начальной моделью, что принципиально важно для согласования с гелиосейсмическими определениями содержания гелия. Величина осаждения кислорода составляет $\Delta X_O^{CZ} = -0.0014$. Относительные доли осаждения (то есть $\Delta X_i/X_{i0}$) качественно подобны, хотя и уменьшаются с ростом заряда (особенно быстро для малых зарядов Z_i). Масса и заряд частиц влияют на диффузию противоположным образом, зависимость от заряда существенна и приводит к необходимости учета изменения степени ионизации элементов по радиусу и с течением времени.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 05-02-17302-а.

Литература

- Агеев Е.П. // Неравновесная термодинамика. УРСС. М. 2001.
- Аюков С.В., Батурин В.А., Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Старостин А.Н., Фортов В.Е. // Письма в ЖЭТФ. 2004а. Т.80. С.163.
- Аюков и др. (Ayukov S.V., Baturin V.A., Gryaznov V.K., Iosilevskiy I.L. and Starostin A.N.) // Equation of State and Phase-Transition in Models of Ordinary Astrophysical Matter. AIP Conf. Proc. 2004. P. 178.
- Аюков С.В., Батурин В.А., Горшков А.Б. // 2006. данный сборник.
- Мишад, Профитт (Michaud G., Proffitt C.R.) // Inside the stars, IAU Colloq. 137/Eds. W.Weiss and A.Baglin: ASP Conference Series. 1993. V.40. P.246.
- Туркот и др. (Turcotte S., Richer J., Michaud G., Iglesias C.A., Rogers F.J.) // Astrophys. J. 1998. V.504. P.539.