



Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. С. Векслер, В. М. Дубнер, К расчету статистической суммы атома, *TBT*, 1966, том 4, выпуск 5, 730–732

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:
IP: 44.211.24.175
9 ноября 2024 г., 12:28:00



В общем $\lambda(T_e)$ зависит от многих факторов: степени ионизации, содержания различных компонентов, вида кривой упругого рассеяния. В случае рассеяния электронов с температурой 0,2 эВ исключительно на атомах аргона коэффициент $\lambda(T_e)$ при расчете по [5] близок к двум. Если интерпретировать наши результаты измерения проводимости по теории [5], сечение электропроводности для аргона окажется близким к рассчитанному в [2].

Считаю своим долгом поблагодарить В. С. Голубева и А. Ф. Настоящего за полезную дискуссию.

Москва

Поступила в редакцию
11 XII 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. В. С. Голубев, Г. А. Касабов, В. Ф. Копах. Теплофизика высоких температур, 2, № 4, 1964.
2. В. П. Колесников. Тр. ФИАН, 30, 1964.
3. E. Labois, P. Ricateau. Доклад на международном симпозиуме по свойствам и применению низкотемпературной плазмы при XX Международном конгрессе по теоретической и прикладной химии. М., 1965.
4. A. G. Engelhardt, A. V. Phelps. Phys. Rev., 133, № 2A, 1964.
5. А. Ф. Настоящий. Теплофизика высоких температур, 1, № 2, 1963.

УДК 539.184.5

К РАСЧЕТУ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ АТОМА

Л. С. Векслер, В. М. Дубнер

При расчете свойств низкотемпературной плазмы необходимо знать статистическую сумму по связанным состояниям электрона в атоме (в дальнейшем ограничимся атомами с одним валентным электроном)

$$Q = 2 + \sum_i g_i \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right), \quad (1)$$

где E_i — энергии уровня, отсчитываемая от основного состояния; g_i — степень вырождения этого уровня; T — температура в энергетических единицах; суммирование ведется по всем реализующимся возбужденным состояниям. Если число последних велико, то основной вклад в сумму дают высоковозбужденные уровни, для которых $E_i \approx I$ — потенциалу ионизации и

$$Q \approx 2 + \exp\left(-\frac{I}{T}\right) \sum_i g_i = 2 + N \exp\left(-\frac{I}{T}\right). \quad (2)$$

Здесь $N \gg 1$ — полное число фактически реализующихся дискретных состояний. Разумеется, формулу (2) можно уточнить, если в сумме (1) выделить несколько первых возбужденных уровней E_α

$$Q = 2 + \sum_\alpha g_\alpha \exp\left(-\frac{E_\alpha}{T}\right) + \left(N - \sum_\alpha g_\alpha\right) \exp\left(-\frac{I}{T}\right). \quad (2a)$$

Наиболее распространен следующий способ оценки числа N . Уровни считаются водородоподобными и предполагается, что состояния с главным квантовым числом, большим некоторого $n_{\max} \gg 1$, не реализуются. Тогда

$$N = 2 \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \approx \frac{2}{3} n_{\max}^3. \quad (3)$$

Хорошо известны три способа выбора n_{\max} : 1) $n_{\max}^2 = R_0$ — «обрыв на среднем расстоянии между заряженными частицами R_0 » (всюду используются атомные единицы); 2) $n_{\max}^2 = (2T)^{-1}$; 3) $n_{\max}^2 = R_D$ — «обрыв на дебаевском радиусе R_D ».

Тогда

$$N_1 \approx \frac{2}{3} R_0^{3/2} \sim c_e^{-3/2}, \quad N_2 \approx \frac{1}{3\sqrt{2}} T^{-3/2}, \quad N_3 \approx \frac{2}{3} R_D^{3/2} \sim \frac{T^{-3/2}}{c_e} \quad (4)$$

(c_e — концентрация электронов). N_1 не зависит явно от температуры, а N_2 — от концентрации электронов, что качественно неудовлетворительно. Кроме того, N_2 убывает с ростом T , что не согласуется со следующими соображениями. Величина N складывается в основном из большого числа высоковозбужденных состояний и определяется взаимодействием слабо связанного (т. е. почти свободного) электрона со свободными зарядами. С увеличением средней энергии последних это взаимодействие уменьшается, что должно приводить к росту N . Поэтому рассмотрим подробнее способ «обрыва на R_D ». Выражение $n_{\max}^2 = R_D$ может быть получено из соотношений для сдвига водородоподобных уровней в дебаевском поле [1]. Более строгой является замена кулоновского поля атомного остатка статическим дебаевским потенциалом

$$V = -\frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{R_D}\right) \quad (5)$$

и решение задачи на собственные значения, что связано с громоздкими вычислениями [2], поскольку теория возмущений непригодна для слабо связанных уровней. Кроме того, использование потенциала (5) некорректно при расчете нижних уровней, где средний импульс электрона много больше среднетеплового $(mT)^{1/2}$, и дебаевская экранировка отсутствует. Поэтому очень точное вычисление статистической суммы для электрона в поле (5) физически не всегда оправдано.

Величину Q в дебаевской плазме можно оценить более простым способом.

Выше отмечалось, что основной вклад в N дают верхние уровни, которые можно рассматривать квазиклассически и для которых применение статического дебаевского потенциала вполне корректно. В квазиклассическом приближении полное число дискретных состояний в таком поле (с учетом двукратного вырождения по спину) равно [3]

$$N = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} \int (-V)^{3/2} dr = \frac{16}{9\sqrt{3}\pi} R_D^{3/2}, \quad (6)$$

откуда

$$Q \approx 2 + \frac{16}{9\sqrt{3}\pi} R_D^{3/2} \exp\left(-\frac{I}{T}\right) \quad (7)$$

Величина (6) несколько завышает число дискретных состояний по сравнению с точным [2], что, впрочем, в выражении для Q компенсирует занижение суммы, возникающее при замене E_i на I . Хорошее совпадение числа N_2 , получаемого интуитивным методом «обрыва на дебаевском радиусе», с квазиклассическим числом дискретных состояний, — случайность. Достаточно заметить, что в сумме (3) учитываются состояния с моментами $l \leq n_{\max} - 1 \approx R_D^{1/2}$, в то время как в дебаевском поле не реализуются уровни с $l(l+1) > R_D/e$ ($e = 2,718\dots$) [2].

В заключение укажем, как пользоваться при конкретных расчетах свойств газов известными таблицами Самуйлова и Олевинского [4] с учетом приведенных выше соображений. Из выражения

$$N = \frac{2}{3} n_{\max}^3 = \frac{16}{9\sqrt{3}\pi} R_D^{3/2}$$

получаем n_{\max} , по которому при заданной температуре в таблицах [4] сразу находится $Q(n_{\max}, T)$ и производные этой величины.

Авторы признательны А. М. Семенову за ряд замечаний и К. И. Серякову, обнаружившему досадную ошибку в первоначальном варианте работы.

Примечание при корректуре. Полное число связанных состояний в поле (5) можно найти также из классических соображений. Плотность этих состояний с энергией $-E \leq 0$ есть

$$\begin{aligned} \rho(E) &= (2\pi)^{-3} \int \delta\left[-E - \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{R}\right)\right] dp dr = \\ &= \frac{2^{3/2}}{\pi} (\tau R)^{5/2} \int_0^1 (e^{-\tau x} - x e^{-\tau})^{1/2} x^{3/2} dx \end{aligned} \quad (D1)$$

где τ — корень уравнения $\exp(-\tau) = \tau ER$. В области больших E $\tau \sim 1/RE \ll 1$, и

$$\rho(E) = \left(\frac{1}{2} \tau R \right)^{5/2} \left(1 - \frac{5}{32} \tau^2 + \dots \right) = (2E)^{-5/2} \left(1 - \frac{5}{2} \frac{1}{ER} + \frac{135}{32} \frac{1}{E^2 R^2} + \dots \right), \quad (D2)$$

т. е. плотность сильно связанных состояний мало отличается от кулоновской $(2E)^{-5/2}$, которая расходится при $E \rightarrow 0$. Использование экранированного потенциала устраняет расходимость, ибо при $E \rightarrow 0$ $\tau \rightarrow \infty$, и $\rho \rightarrow 12\pi^{-1/2} R^{5/2}$. Полное число связанных состояний (с учетом спина) находится интегрированием:

$$N = 2 \int_0^\infty \rho(E) dE = \frac{2}{R} \int_0^\infty \rho(\tau) e^{-\tau} \frac{1+\tau}{\tau^2} d\tau.$$

Величина последнего интеграла определяется областью малых τ , где для ρ можно воспользоваться разложением (D2), после чего

$$N \approx \frac{5\pi^{1/2}}{2^{7/2}} R_D^{3/2},$$

что примерно в полтора раза больше величины (6).

Институт технической теплофизики
Академии наук СССР
Научно-исследовательский институт
высоких температур

Поступила в редакцию
16 VI 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. C. R. Smith. Phys. Rev., **A134**, 1235, 1964.
2. В. Л. Бонч-Бруевич, В. Б. Гласко. Оптика и спектроскопия, **14**, 495, 1963; Физика твердого тела, **4**, 510, 1962.
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. Физматгиз, 1963.
4. Е. В. Самуйлов, К. К. Олевинский. Таблицы сумм для расчета термодинамических свойств газов. ВЦ АН СССР, 1963.

УДК 539.196.3 : 546.17 + 546.21

КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА И АЗОТА ПРИ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Ю. Н. Беляев, В. Б. Леонас

В [1] был описан метод определения параметров потенциала межмолекулярного взаимодействия в области отталкивания на основе данных по упругому рассеянию быстрых лучков.

Основное соотношение, позволяющее найти параметры потенциала, принимаемого в виде $V(r) = K/r^n$ получено для сферически симметричных систем (например, атомов благородных газов). При изучении рассеяния молекул кислорода и азота [2] мы сталкиваемся со случаем взаимодействия несферических систем, однако с достаточным приближением взаимодействие рассматриваемых частиц в диапазоне изученных расстояний может описываться эффективными сферически симметричными потенциалами. Параметры этих потенциалов представлены в табл. 1. С помощью известных формул для первого приближения коэффициентов переноса [3], воспользовавшись этими параметрами, можно в диапа-

Таблица 1
Параметры потенциалов $V(r) = K/r^n$ (эВ) взаимодействия кислорода и азота

Система	K	n	r, Å
N ₂ — N ₂	550	7,4	2,34—3,05
N ₂ — O ₂	330	6,8	2,32—3,05
O ₂ — O ₂	240	6,3	2,32—3,15