

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин, Особенности деба-
вского экранирования и уравнение состояния ча-
стично ионизованной плазмы,
ТВТ, 1972, том 10, выпуск 5, 939–949

<https://www.mathnet.ru/tvt10622>

Использование Общероссийского математического портала Math-
Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользователь-
ским соглашением

<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.80

18 мая 2025 г., 06:06:10



УДК 533.9.01

ОСОБЕННОСТИ ДЕБАЕВСКОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ И УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЧАСТИЧНО ИОНИЗОВАННОЙ ПЛАЗМЫ

В. С. Воробьев, А. Л. Хожкин

Для описания частично ионизованной плазмы используется модифицированный гамильтониан, полученный из обычного кулоновского электрон-ионного гамильтониана с помощью канонического преобразования. Модифицированный гамильтониан в нулевом приближении описывает атомы, свободные электроны и ионы. Потенциал взаимодействия последних отличается от кулоновского. Это отличие сказывается на виде дебаевского члена и проявляется в более медленном его росте с увеличением плотности. Обсуждается вытекающее из такого рассмотрения уравнение состояния.

Начиная с работ [1, 2], термодинамические свойства невырожденной ($n_e \lambda_e^3 \ll 1$; n_e — плотность электронов; $\lambda_e = \hbar(\beta/2m_e)^{1/2}$ — де-бройлевская длина волны электрона; β — обратная температура) частично ионизованной ($\beta I \gg 1$, I — потенциал ионизации атома водорода) плазмы вычислялись неоднократно [2—6]. Второй вириальный коэффициент определялся вершиной лестничного типа [4], что позволяло учесть парные связанные состояния электронов и ионов — атомы. При этом в части диаграмм, содержащихся на лестничной вершине, кулоновский потенциал заменялся экранированным, что устраняло расходимости, вызванные дальнордействием. Полученное таким образом уравнение состояния справедливо в области $\gamma \ll 1$ ($\gamma = \beta e^2 n^{1/2}$).

В этих приближениях большое число связанных состояний, характерное для этой задачи, никак не отражено в картине дебаевского экранирования. Вместе с тем, наличие их требует, по существу, переопределения понятия свободных электронов и ионов как частиц, не образующих атомы. Именно такие частицы участвуют в коллективном экранировании. Электроны и ионы, связанные в атомы, осуществляют парную экранировку. Учет этих эффектов на основе обычного электрон-ионного кулоновского гамильтониана потребовал бы выхода за рамки общепринятых приближений, используемых при расчете второго вириального коэффициента. Поэтому здесь предпочтительнее сначала произвести перестройку электрон-ионного гамильтониана так, чтобы он в нулевом приближении отражал наличие связанных состояний и затем уже развивать теорию возмущения по отношению к этому перестроенному гамильтониану. Осуществить эту перестройку можно, используя унитарное каноническое преобразование (к.п.), предложенное авторами в [7].

В предлагаемой работе для описания частично ионизованной плазмы используется модифицированный гамильтониан, полученный в [7]. По духу он соответствует трехкомпонентной или химической модели плазмы, поскольку в нулевом приближении описывает смесь трех идеальных газов электронов, ионов и атомов. Однако в отличие от нее потенциал взаимодействия свободных электронов и ионов не кулоновский, он имеет дополнительное слагаемое, запрещающее этим частицам образовывать атомы.

Такое искажение электрон-ионного потенциала должно сказаться при получении дебаевской поправки.

В данной работе дополнительное взаимодействие рассматривается в рамках метода Хартри. В результате спектр свободных электронов и ионов становится отличным от спектра свободных частиц. Кулоновская часть взаимодействия учитывается обычными методами, однако в качестве нулевых используются функции Грина, найденные в приближении Хартри по дополнительному взаимодействию. Окончательный результат представлен в таком же виде, как и в работах [1, 2], только дебаевский член умножается на некоторую поправочную функцию, которая с ростом плотности уменьшает дебаевскую поправку. Полученное уравнение состояния при экстраполяции в область больших γ не обнаруживает тенденции к потере термодинамической устойчивости*.

1. Каноническое преобразование гамильтониана. Рассмотрим систему фермионов разных сортов, описываемых гамильтонианом

$$H = \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \mu_{\nu}) a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \sum_{\nu, \omega, \nu'} (v\omega | V | \omega' \nu') a_{\nu}^{\dagger} a_{\omega}^{\dagger} a_{\omega} a_{\nu'}, \quad (1)$$

где a_{ν} — фермиевский оператор уничтожения; ν — индекс, характеризующий в общем случае импульс, спин, сорт фермиона; ε_{ν} — энергия фермиона; μ_{ν} — химический потенциал, определяемый из условия $\sum_{\nu} \langle a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} \rangle = N$ для фермионов каждого сорта (N — число фермионов определенного сорта); V — энергия взаимодействия пары частиц. В дальнейшем предполагается, что V допускает образование связанных состояний Ферми-частиц различных сортов.

В работе [7] для выделения парных связанных состояний предложено унитарное каноническое преобразование следующего вида:

$$S = \exp \sum_{\nu, \omega} f_{\alpha} \varphi_{\alpha}(v\omega) [a_{\nu}^{\dagger} a_{\omega}^{\dagger} Q_{\alpha} - Q_{\alpha} a_{\omega} a_{\nu}], \quad (2)$$

где a_{ν} — фермиевский оператор; Q_{α} — бозевский оператор; f_{α} — произвольная вещественная функция; $\varphi_{\alpha}(v\omega)$ — ортонормированная система собственных функций двухчастичного уравнения Шредингера для фермионов двух сортов ν и ω , взаимодействующих с потенциалом V .

Преобразование (2), будучи унитарным, не является обратимым. Действительно, величина $S Q_{\alpha} S^{\dagger}$ не имеет аналога в исходном пространстве. В [7] для устранения этой трудности к исходному гамильтониану H добавлялся член $\sum_{\alpha} T_{\alpha} P_{\alpha}^{\dagger} P_{\alpha}$ соответствующий идеальному Бозе-газу со спектром T_{α} . Видоизмененный таким образом гамильтониан H подвергался к.п. (2) и вычислялись термодинамические величины. Из последних вычитался вклад от добавленного Бозе-газа, который точно известен. Если бы вся эта процедура проводилась точно, ответ не зависел бы от T_{α} . Однако поскольку вычисление средних после к.п. проводится по теории возмущений, в окончательном ответе остается зависимость от T_{α} . Погрешность от такой процедуры может быть сглажена минимизацией средних по T_{α} , например, термодинамического потенциала. После к.п. гамильтониан системы может быть представлен в виде

$$H = \sum_{\alpha} (\varepsilon_{\nu} - \mu_{\nu}) a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + \sum_{\alpha} (E_{\alpha} \sin^2 f_{\alpha} + T_{\alpha} \cos^2 f_{\alpha}) Q_{\alpha}^{\dagger} Q_{\alpha} - \sum_{\alpha \nu \omega} \sin f_{\alpha} \cos f_{\alpha} (E_{\alpha} - T_{\alpha}) \varphi_{\alpha}(v\omega) (a_{\nu}^{\dagger} a_{\omega}^{\dagger} Q_{\alpha} + \dots) \quad (3)$$

* В [8, 9] отмечается, что экстраполяция уравнения состояния, полученного в рамках трехкомпонентной модели, в область больших γ приводит к потере термодинамической устойчивости.

$$+ Q_{\alpha}^{+} a_{\alpha} a_{\nu} + \sum_{\nu, \omega, \omega'} \left[(v\omega | V | \omega' \nu') - \sum_{\alpha} \sin^2 f_{\alpha} (E_{\alpha} - T_{\alpha}) \times \right. \\ \left. \times \varphi_{\alpha}(v\omega) \varphi_{\alpha}(\nu' \omega') \right] a_{\nu}^{+} a_{\omega}^{+} a_{\omega} a_{\nu} + H',$$

где E_{α} — собственное значение энергии уравнения Шредингера для фермионов ν и ω , взаимодействующих с потенциалом V . H' состоит из бесконечного ряда, описывающего многочисленные взаимодействия [7], которые в данной работе не рассматриваются.

Как видно из (3), гамильтониан содержит два параметра f_{α} и T_{α} , которые должны определяться из уравнений

$$\delta\Omega / \delta f_{\alpha} = \langle \delta H / \delta f_{\alpha} \rangle = 0; \quad (4)$$

$$\delta\Omega / \delta T_{\alpha} = \langle \delta H / \delta T_{\alpha} \rangle - \delta\Omega_0 / \delta T_{\alpha} = 0, \quad (5)$$

где $\langle \dots \rangle$ означают квантово-статистическое усреднение; Ω — термодинамический потенциал, соответствующий гамильтониану H ; Ω_0 — термодинамический потенциал идеального газа бозонов, добавленный в исходный гамильтониан.

Заметим, что уравнение (4) можно переписать в эквивалентном виде

$$\delta\Omega / \delta f_{\alpha} = \sum_{\nu, \omega} \varphi_{\alpha}(v\omega) \langle [(a_{\nu}^{+} a_{\omega}^{+} Q_{\alpha} - Q_{\alpha}^{+} a_{\omega} a_{\nu}), H]_- \rangle = 0,$$

которое для нашего случая соответствует известному «принципу компенсации опасных диаграмм», предложенному Н. Н. Боголюбовым [10] в теории сверхпроводимости. В нашем случае «опасными» являются процессы, в которых допускается превращение фермионов в бозоны и наоборот. В низших порядках теории возмущения это приводит к требованию, чтобы коэффициент при опасном члене в гамильтониане $a^{+} a^{+} Q$ обратился в нуль. Это возможно, если $\sin f_{\alpha} = 0$, $T_{\alpha} = E_{\alpha}$ и $\cos f_{\alpha} = 0$. Первые два условия тривиальные, и приводят к тому, что $H = H$. Третье условие получено в [7] вариационным методом на основе первого порядка теории возмущения. В данной работе воспользуемся именно таким выбором f_{α} .

2. Электрон-ионный потенциал. После канонического преобразования во взаимодействии свободных электронов и ионов появляется дополнительный член

$$W(v\omega\omega'\nu') = - \sum_{\alpha} (E_{\alpha} - T_{\alpha}) \varphi_{\alpha}(v\omega) \varphi_{\alpha}(\nu'\omega'), \quad (6)$$

где для электрона с массой m_e и иона с массой m_i

$$E_{\alpha} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} - \mu_e - \mu_i + E_n. \quad (7)$$

Здесь \mathbf{P} — суммарный импульс электрон-ионной пары; $M = m_e + m_i$; E_n — энергия связи водородного состояния с главным квантовым числом n .

Выясним, к каким особенностям во взаимодействии электронов и ионов приводит наличие этого члена. В интегральной части уравнения Шредингера для электрона ν и иона ω возникнет выражение

$$- \sum_{\nu''\omega''} W(v\omega\omega''\nu'') \varphi_{\alpha}(\nu''\omega'') = - \varphi_{\alpha}(v\omega) (E_{\alpha} - T_{\alpha}),$$

которое приводит к замене собственного значения E_{α} на T_{α} (T_{α} — произвольная величина). Целесообразно выбрать его в виде

$$T_{\alpha} = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} - \mu_e - \mu_i + E_n \theta(E_n - E'), \quad (8)$$

где $\theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$ E' — некоторое значение энергии связи, ко-

торое должно определяться из условия $\delta\Omega / \delta E' = 0$. Таким образом, если $|E'|$ достаточно мало, свободные электроны и ионы взаимодействуют, не образуя связанных состояний.

Найдем выражение для суммарного потенциала взаимодействия электронов и ионов в координатном представлении. При этом заметим, что

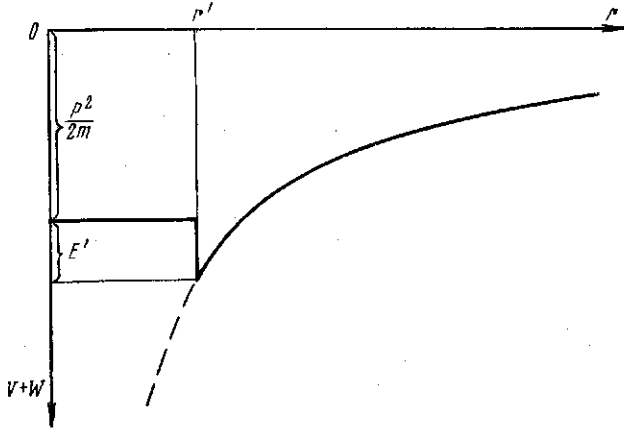


Рис. 1. Вид электрон-ионного потенциала после к.п. $r' = e^2 / \frac{p^2}{2\mu} + |E'|$. Пунктир — кулоновский потенциал e^2 / r

в сумме по α в (6) основной вклад дают возбужденные состояния с большими n , для которых при $\beta E_n \ll 1$ справедливо квазиклассическое описание. Поэтому заменяя в (6) $\sum_{\alpha} \dots \rightarrow \int dE \delta\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} - E\right)$, а $\varphi_n \rightarrow 1$,

получим следующее выражение для потенциала взаимодействия электронов и ионов:

$$V(r) + W(r, \mathbf{p}) = -\frac{e^2}{r} \theta\left(\frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} - E'\right) - \frac{p^2}{2\mu} \theta\left(\frac{e^2}{r} - \frac{p^2}{2\mu} + E'\right),$$

$$\mu^{-1} = m_e^{-1} + m_i^{-1}; \quad W(r, \mathbf{p}) = \left(\frac{e^2}{r} - \frac{p^2}{2\mu}\right) \theta\left(\frac{e^2}{r} - \frac{p^2}{2\mu} + E'\right) \quad (9)$$

При записи (9) мы воспользовались тем, что в силу $m_e / m_i \ll 1$, импульс относительного движения электрона и иона практически равен импульсу электрона \mathbf{p} . На рис. 1 представлен вид потенциала (9). Видно, что для быстрых электронов он мало отличается от кулоновского, в то время как для медленных это отличие весьма существенно.

3. **Приближение Хартри.** Вычислим поправку к энергии электрона, иона, учитывая некулоновскую часть взаимодействия W в приближении Хартри. Общее выражение для поправки к энергии фермиона ν имеет вид

$$\sum_{\nu} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \omega} (E_{\alpha} - T_{\alpha}) \varphi_{\alpha}^2(\nu \omega) n_{\omega}; \quad (10)$$

где

$$n_{\omega} = \langle \alpha_{\omega}^{\dagger} \alpha_{\omega} \rangle.$$

Как и раньше, при вычислении суммы по α можно воспользоваться ква-

* В данной работе заряд иона полагается равным единице.

зиклассическим приближением. Тогда для электрона с учетом (8)

$$\begin{aligned} \sum_e \langle \mathbf{p} \rangle &= -\frac{e^{\beta\mu_e}}{\Lambda_e^3} \int dE d\mathbf{r} \delta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} - E\right) \theta\left(-\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{e^2}{r} + E'\right) E = \\ &= \frac{1}{\beta} \frac{2\pi}{3} \gamma_e^3 \left[\beta \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - E' \right) \right]^{-2}; \quad \Lambda_e = \beta^{-3/2} \hbar^3 / (2\pi m_e)^{3/2} \end{aligned} \quad (11)$$

Для иона поправка к энергии — величина постоянная, равная

$$\sum_i = - \int dE \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{r}}{h^3} \delta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{r} - E\right) \theta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{e^2}{2} + E'\right) E n_e(\mathbf{p}), \quad (12)$$

где $n_e(\mathbf{p}) = \exp\left[-\beta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} - \mu_e\right)\right]$. Проводя вычисления в (12), найдем

$$\sum_i = \frac{1}{\beta} \frac{8\sqrt{\pi}}{3} \gamma_e^3 \frac{1}{\gamma_{e0}} \int_0^\infty \frac{t^2 e^{-\varepsilon t^2} dt}{(1+t^2)^2}, \quad (13)$$

где $\varepsilon = |\beta E'|$.

Функции Грина в этом приближении будут иметь вид

$$G(\nu, \omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_\nu + \mu_\nu - \Sigma_\nu)^{-1}. \quad (14)$$

Используя известное выражение для поправки к Ω через одночастичные функции Грина, легко найти поправки к термодинамическим потенциалам, которые для электронов и ионов будут иметь вид

$$\beta \Delta \Omega_e^x / V = - \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \exp[-\beta((\mathbf{p}^2/2m_e) - \mu_e)] (\exp(-\beta \Sigma_e(\mathbf{p})) - 1), \quad (15)$$

$$\beta \Delta \Omega_i^x / V = - \frac{e^{\beta\mu_i}}{\Lambda_i^3} (e^{-\beta \Sigma_i} - 1), \quad (16)$$

где V — объем системы.

Полные числа «свободных» электронов и ионов:

$$\tilde{n}_e = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d\mathbf{p} \exp\left(-\beta\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_e} + \Sigma_e(\mathbf{p}) - \mu_e\right)\right); \quad (17)$$

$$\tilde{n}_i = e^{\beta(\mu_i - \Sigma_i)} / \Lambda_i^3. \quad (18)$$

Если в выражениях (15) — (18) удерживать только линейные члены по Σ_e и Σ_i , то мы перейдем к учету взаимодействия W в первом порядке теории возмущения, которое рассматривалось в [7].

4. Дебаевское экранирование после к.п. Обычно дебаевская поправка к Ω находится в кольцевом приближении: суммируется бесконечная последовательность диаграмм, где кулоновские потенциалы связаны поляризационными петлями. Последние строятся из функций Грина для свободных частиц. Используем при построении поляризационных операторов найденные выше хартриевские функции Грина по взаимодействию W . Тем самым будет отражена специфика взаимодействия свободных электронов и ионов. Далее, представим гамильтониан взаимодействия в виде $W + gV$, где перед кулоновской частью взаимодействия V введена произвольная константа связи g . Учитывая взаимодействие W в приближении Хартри, что эквивалентно замене $\varepsilon_\nu \rightarrow \varepsilon_\nu + \Sigma_\nu$ в спектре фермионов, найдем поправку к термодинамическому потенциалу за счет кулоновской части взаимодействия в кольцевом приближении интегрированием по константе связи при фиксированном взаимодействии W . В результате полу-

чим следующее выражение для поправки к Ω :

$$-\frac{\beta\Delta\Omega_D}{V} = \frac{2\sqrt{\pi} e^2\beta^{3/2}}{3} (\tilde{n}_e + \tilde{n}_i)^{3/2}. \quad (19)$$

Как видно, все отличие от обычного выражения состоит в переопределении числа «свободных» электронов и ионов.

5. Лестничное приближение после к.п. Поскольку уравнение Шредингера с потенциалом $V + W$ решается точно, можно вычислить сумму графиков лестничного типа с потенциалом $V + W$. Легко показать, что выражение для лестничной вершины с потенциалом $V + W$ имеет вид

$$\Gamma_{ei}(\mathbf{p}\mathbf{p}'\mathbf{P}) = V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') + \sum_n \frac{\varphi_n(\mathbf{p}) \left(T_n - \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu}\right) \left(T_n - \frac{\mathbf{p}'^2}{2\mu}\right) \varphi_n(\mathbf{p}')}{ig_4 - \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - T_n + \mu_e + \mu_i} - \sum_n (E_n - T_n) \varphi_n(\mathbf{p}) \varphi_n(\mathbf{p}'), \quad (20)$$

где $\mu_e^{-1} = m_e^{-1} + m_i^{-1}$, g_4 — четвертая компонента импульса центра тяжести. Поправка к концентрации электронов (ионов), как показано в приложении 1, связана с Γ соотношением

$$\Delta n_e = -\frac{1}{2\beta V} \frac{\partial}{\partial \mu_e'} \sum_{g_i, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} \Gamma_{ei}(\mathbf{p}\mathbf{p}\mathbf{P}) \frac{e^{ig_4\tau}}{ig_4 - \frac{\mathbf{p}^2}{2M} - \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \mu_e' + \mu_i} \Big|_{\substack{\tau \rightarrow +0 \\ \mu_e' = \mu_e}}. \quad (21)$$

Выполняя в (21) суммирование по g_4 , затем дифференцирование по μ_e' и приравнявая $\mu_e' = \mu_e$, получим в больцмановском пределе

$$\Delta n_e = -\frac{1}{2V} \sum_{n, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2M - \mu_e - \mu_i)} \varphi_n^2(\mathbf{p}) \left\{ e^{-\beta T_n} - e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2\mu)} \left[1 - \left(E_n - \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} \right) \right] \right\}. \quad (22)$$

Используя известное соотношение $\Delta\Omega = -\int_{-\infty}^{\mu} \Delta n(\mu') d\mu'$, найдем поправку

$\Delta\Omega$ в лестничном приближении. Добавляя к этому результату термодинамический потенциал идеального газа бозонов и вычитая вклад Бозе-газа со спектром T_n , добавленного в исходный гамильтониан, получим полный вклад в Ω за счет электрон-ионного взаимодействия

$$-\frac{\beta\Delta\Omega_{ei}}{V} = \sum_{n, \mathbf{p}, \mathbf{p}'} e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2M - \mu_e - \mu_i)} \varphi_n^2(\mathbf{p}) \left\{ e^{-\beta E_n} - e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2\mu)} \left[1 - \beta \left(E_n - \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} \right) \right] \right\}. \quad (23)$$

Это выражение, не содержащее параметра T_n , — поправка к Ω за счет второго вириального коэффициента (разновидность формулы Бете — Уленбека). В отличие от существующих в литературе представлений для второго вириального коэффициента [3] в (23) не содержится интегрирование по заряду.

Из (23) следует вычесть диаграмму второго порядка по кулоновскому потенциалу, учтенную нами в кольцевом приближении. Легко показать, что поправка к n_e за счет этой диаграммы будет иметь вид

$$\Delta n_e = \frac{\beta^2}{4V} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{P}} V^2(\mathbf{p} - \mathbf{p}') e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2M - \mu_e - \mu_i)} e^{-\beta(\mathbf{p}'^2/2\mu)}; \quad (24)$$

или используя тождество

$$\sum_{\mathbf{p}'} e^{-\beta(\mathbf{p}'/2\mu)} V(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \equiv \sum_{n\mathbf{p}'} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - E_n \right) \varphi_n(\mathbf{p}') e^{-\beta(\mathbf{p}'/2\mu)} \varphi_n(\mathbf{p}), \quad (25)$$

получим

$$\Delta n_o = \frac{e^{\beta(\mu_e + \mu_i)} \beta^2}{4V} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}n} \varphi_n^2(\mathbf{p}) \left(E_n - \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} \right) e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2\mu + \mathbf{p}'^2/2\mu)}. \quad (26)$$

Интегрируя это выражение по μ_e и вычитая полученное выражение из (23), найдем окончательно

$$-\frac{\beta \Delta \Omega_{ei}}{V} = \sum_{n\mathbf{p}\mathbf{p}'} e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2\mu - \mu_e - \mu_i)} \varphi_n^2(\mathbf{p}) \left\{ e^{-\beta E_n} - e^{-\beta(\mathbf{p}^2/2\mu)} \left[1 + \beta \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - E_n \right) + \frac{\beta^2}{2} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - E_n \right)^2 \right] \right\}. \quad (27)$$

Аналогичным образом записываются вклады от электрон-электронного и ион-ионного взаимодействий. Последние, естественно, не содержат суммы по дискретным состояниям.

При вычислении вклада от выражений типа (27) существенно, что при $\beta I \gg 1$ состояния электронов и ионов непрерывного спектра, а также сильно возбужденные связанные состояния можно описывать квазиклассически. Запишем квазиклассический предел (27). Для этого $\varphi_n^2(\mathbf{p}) \rightarrow 1$,

$$\sum_{n\mathbf{p}} \varphi_n^2(\mathbf{p}) \dots \rightarrow \int dE \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{r}}{(2\pi\hbar)^3} \delta \left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{e^2}{r} \right) \dots E_n \rightarrow E. \quad \text{Затем, выпол-$$

няя интегрирование по \mathbf{p} , найдем, что вклад связанных состояний ($E < 0$)

$$\Delta \Omega_{ei}(E < 0) \propto I_{ei}'(E < 0) + I_{ei}''(E < 0), \quad (28)$$

где

$$I_{ei}' = \int_0^\infty \frac{dt}{t^4} \left[\Phi(\sqrt{t}) e^t - \frac{2\sqrt{t}}{\sqrt{\pi}} - \frac{4t^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{8t^{5/2}}{15\sqrt{\pi}} \right], \quad (29)$$

$$I_{ei}'' = - \int_0^\infty \frac{dt}{t^4} \left[\left(\Phi(\sqrt{t}) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} e^{-t} \right) \left(1 + t + \frac{t^2}{2} \right) - \frac{4t^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{8t^{5/2}}{15\sqrt{\pi}} \right], \quad (30)$$

$$\Phi(\sqrt{t}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^t e^{-u} \frac{du}{\sqrt{u}}, \quad t = \frac{\beta e^2}{r},$$

I_{ei}' экспоненциально расходится при $t \rightarrow \infty$ (малые r) и требует квантово-механического вычисления, поэтому при расчете $\Delta \Omega_{ei}' \sim I_{ei}'$ вернемся к квантовомеханическому описанию, получим

$$-\beta \Delta \Omega_{ei}' / V = (e^{\beta(\mu_e + \mu_i)} / \Lambda_i^3) \Sigma_n, \quad (31)$$

где $\Sigma_n = \sum_{\mathbf{p}} 2\pi^2 (e^{-\beta E_n} - 1 + \beta E_n)$. Это — известное выражение для вклада связанных состояний в термодинамический потенциал плазмы.

При расчете $I_{ei}''(E < 0)$ существенный вклад дают сильно возбужденные состояния $\beta E_n < 1$, малые t , большие r , поэтому расчет этой величины проведем совместно с вкладом от электрон-ионного взаимодействия в непрерывном спектре, а также с электрон-электронным и ион-ионным

взаимодействиями. Так,

$$I_{ei}(E > 0) = \int_0^{\infty} \frac{dt}{t^4} \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} + e^t(1 - \Phi(\sqrt{t})) \right\} \left[1 - e^{-t} \left(1 + t + \frac{t^2}{2} \right) \right], \quad (32)$$

$$I_{ee} = I_{ii} = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{dt}{t^4} \left(e^{-t} - 1 + t - \frac{t^2}{2} \right). \quad (33)$$

Суммарный вклад от всего взаимодействия, учтенного квазиклассически

$$I = I_{ei}''(E < 0) + I_{ei}(E > 0) + 2I_{ee} = \\ = \int_0^{\infty} \frac{dt}{t^4} \left(e^t - e^{-t} - 2 - t^2 - e^t \Phi(\sqrt{t}) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{t} + \frac{4t^{3/2}}{3\sqrt{\pi}} + \frac{8t^{5/2}}{15\sqrt{\pi}} \right), \quad (34)$$

или после трехкратного интегрирования по частям

$$I = \frac{1}{6} \int_0^{\infty} \frac{dt}{t} (e^t - e^{-t} - e^t \Phi(\sqrt{t})) = 0. \quad (35)$$

Доказательство (35) приведено в приложении 2. Таким образом, вклад в Ω от идеального газа атомов и суммы лестничных диаграмм по взаимодействию $V + W$ дается выражением (31).

6. Определение вариационного параметра. Уравнение состояния. Запишем суммарное выражение для Ω . При этом следует вычесть из выражений (15), (16) вклад от диаграммы первого порядка по взаимодействию W , учтенный в лестничном приближении. Используя (15), (16), (19), (31), получим следующее выражение для Ω :

$$-\frac{\beta\Omega}{V} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^{\infty} dp e^{-\beta(p^2/2m_e - \mu_e)} (e^{-\beta\Sigma_e(p)} + \beta\Sigma_e(p)) + \\ + \frac{e^{\beta\mu_i}}{\Lambda_i^3} (e^{-\beta\Sigma_i} + \beta\Sigma_i) + \frac{2\sqrt{\pi} e^{\beta^3/2}}{3} (\tilde{n}_e + \tilde{n}_i)^{3/2} + \frac{e^{\beta(\mu_e + \mu_i)}}{\Lambda_i^3} \Sigma_a. \quad (36)$$

Это выражение зависит от произвольного параметра ε , который входит в Σ_e и Σ_i . Найдем его, минимизируя Ω по этому параметру. Получим следующее уравнение для определения ε :

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{-\varepsilon t^2}}{(1+t^2)^4} dt = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\varepsilon t^2} dt}{(1+t^2)^4} \left(1 + \sqrt{\pi} (\gamma_e^3 + \gamma_i^3) \right) \left\{ \exp \left[-\frac{2\pi\gamma_i^3}{\varepsilon^2(1+t^2)} \right] + \right. \\ \left. + \exp \left[-\frac{8\sqrt{\pi}}{3} \frac{\gamma_e^3}{\sqrt{\varepsilon}} \int_0^{\infty} \frac{e^{-\varepsilon t^2}}{(1+t^2)^4} dt \right] \right\}. \quad (37)$$

При выводе (37) мы использовали (10), откуда $\delta\Sigma_v / \delta T_a = \Sigma_{\omega}^2 (v\omega) n_{\omega}$.

В качестве $\varphi_n^2(\mathbf{p})$ использовались водородные волновые функции в импульсном представлении, усредненные по квантовым числам l, m

$$\varphi_n^2(\mathbf{p}) = 16n^2 p_n^5 / \pi^2 (p_n^2 + p^2)^4, \quad p_n^2 = 2\mu |E_n|.$$

В (37)

$$\gamma_{e,i} = \beta e^2 (e^{\beta\mu_{e,i}} / \Lambda_{e,i})^{1/2}.$$

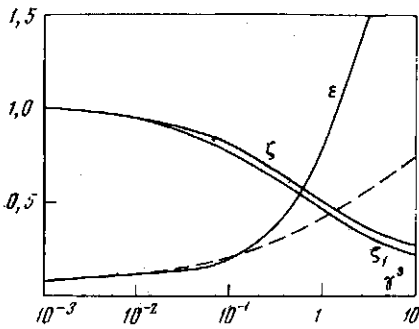


Рис. 2

Рис. 2. Зависимость ϵ , ζ , ζ_1 от γ^3 . Пунктир — асимптотическое выражение (38) для ϵ

Рис. 3. Зависимость $n_a = f(n_e)$ для водородной плазмы при $T = 30\,000^\circ\text{K}$. Прямая линия — формула Саха:

1 — ионизационное уравнение (41); 2 — ионизационное уравнение (42). Пунктирная кривая в обоих случаях $\zeta_1 = 1$

Рис. 4. Приведенное давление $\beta P/n$ в зависимости от плотности n для цезиевой плазмы при $T = 6000^\circ\text{K}$.

Обозначения см. рис. 3

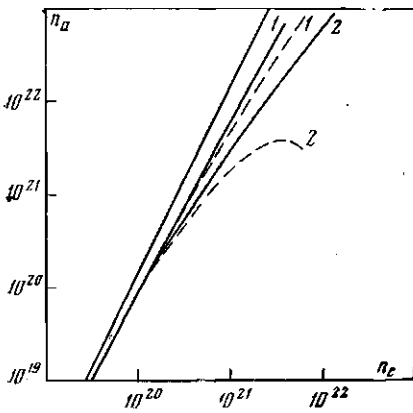


Рис. 3

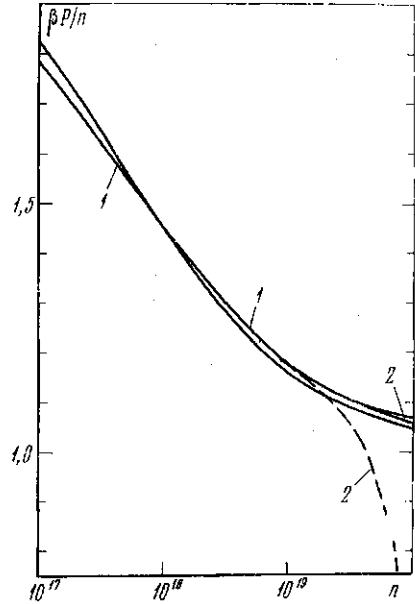


Рис. 4

Заметим, что при $\gamma_{e_i} \rightarrow 0$ уравнение (37) обращается в тождество. Для очень малых γ из (37) следует

$$\epsilon = 1/4 \sqrt{7/\sqrt{6}} \sqrt{\gamma_e^3 / (\gamma_e^3 + \gamma_i^3)^{3/2}} \quad (38)$$

На рис. 2 представлено численное решение уравнения (37) в зависимости от параметра $\gamma^3 = \gamma_e^3 = \gamma_i^3$ и нанесено численное решение (38). Как видно, асимптотика достаточно точна лишь при $\gamma^3 < 10^{-2}$. При больших γ следует пользоваться численным решением. Воспользовавшись найденным решением для ϵ , вычислим Ω с учетом (37). Окончательный результат удобно представить в виде

$$-\frac{\beta\Omega}{V} = \frac{e^{\beta\mu_e}}{\Lambda_e^3} + \frac{e^{\beta\mu_i}}{\Lambda_i^3} + \frac{2\sqrt{\pi}e^{\beta^3/2}}{3} \left(\frac{e^{\beta\mu_e}}{\Lambda_e^3} + \frac{e^{\beta\mu_i}}{\Lambda_i^3} \right)^{3/2} \zeta(\gamma^3) + \frac{e^{\beta(\mu_e + \mu_i)}}{\Lambda_s^3} \Sigma_a, \quad (39)$$

где $\zeta(\gamma^3)$ — поправочная функция к дебаевскому члену, график которой приведен на рис. 2. Как видно, с ростом γ она стремится уменьшить дебаевский член. Для очень малых γ можно найти аналитический вид ζ , если воспользоваться (38):

$$\zeta(\gamma^3) \cong 1 - 7,32(\gamma^3)^{1/2} + 4,87(\gamma^3)^{3/2} + \dots$$

Этот ряд плохо сходится. Важно отметить, что поправки к Ω по плотности имеют вид n^α , где $\alpha > 2$, т. е. они не меняют членов вириального ряда до n^2 .

В тех же приближениях, что и Ω , запишем выражение для полного числа частиц (электронов, ионов):

$$n = \frac{e^{\beta\mu_e}}{\Lambda_e^3} + \sqrt{\pi} e^{\beta\mu_e} \beta^{3/2} \left(\frac{e^{\beta\mu_e}}{\Lambda_e^3} + \frac{e^{\beta\mu_i}}{\Lambda_i^3} \right)^{1/2} \frac{e^{\beta\mu_e}}{\Lambda_e^3} \zeta_1(\gamma^3) + \frac{e^{\beta(\mu_e + \mu_i)}}{\Lambda_i^3} \Sigma_a. \quad (40)$$

Как видно из рис. 2, функция $\zeta_1(\gamma^3)$ близка к ζ . Заметим, что обе эти функции хорошо аппроксимируются выражением $f(x) = 1/1 + \sqrt{x}$. Выражения (39) и (40) отличаются от аналогичных выражений, полученных в [1, 2], наличием поправочных функций ζ и ζ_1 .

7. Обсуждение результатов. Построим при (40) уравнение ионизационного равновесия. Для этого полную концентрацию электронов представим в виде $n = n_e + n_a$, где $n_e = n_e^0 (1 + 1/2 \beta e^2 \kappa \zeta_1)$; $n_{e,i}^0 = e^{\beta\mu_{e,i}} / \Lambda_{e,i}^3$; $n_a = (n_e^0 n_i^0) \Lambda_e^3 \Sigma_a$, $\kappa^2 = 4\pi e^2 \beta (n_e^0 + n_i^0)$. Концентрации n_e и n_a связаны соотношением

$$n_a = n_e^2 \Lambda_e^3 \Sigma_a [1 + 1/2 \beta e^2 \kappa \zeta_1]^{-2}, \quad (41)$$

которое в пределе слабого взаимодействия переходит в формулу Саха, связывающую концентрации атомов n_a и свободных зарядов n_e . Важно отметить, что в (41) κ и ζ_1 определяются концентрацией n_e^0 .

При слабом взаимодействии уравнение (41) с той же степенью точности может быть переписано в виде

$$n_a = n_e^2 \Lambda_e^3 \Sigma_a \exp[-\beta e^2 \kappa \zeta_1], \quad (42)$$

где κ и ζ_1 определяются полными концентрациями свободных зарядов n_e . Уравнение (42) с $\zeta_1 = 1$ известно из литературы [4, 9] и получается в рамках трехкомпонентной или химической модели плазмы. В этом случае атомы рассматриваются как идеальный газ, добавленный к системе свободных зарядов, взаимодействие которых рассмотрено в рамках теории Дебая — Хюккеля.

Обсудим, к каким особенностям приводит экстраполяция уравнений (41) и (42) в область больших плотностей с поправкой ζ_1 и без нее. На рис. 3 построены зависимости $n_a = f(n_e)$ для водородной плазмы при $T = 30\,000^\circ \text{K}$. На рис. 4 построены изотермы $T = 6000^\circ \text{K}$ для цезиевой плазмы. Значения Σ_a , вычисленные по (31), заимствованы из [11]. Сплошная линия соответствует идеальному случаю. Остальные обозначения совпадают с рис. 3.

Как видно из рисунков, наибольшие отклонения от идеальности получаются при использовании уравнения (42). Здесь возможна даже потеря термодинамической устойчивости ($dn_a/dn_e \leq 0$ [9]). Экстраполяция уравнения (41) дает всюду небольшие отклонения от идеальности. Этот факт отмечался в [6]. Введение поправки ζ_1 во всех случаях уменьшает отклонение от идеальности и в случае уравнения (42) делает невозможным обращение dn_a/dn_e в нуль.

Как следует из (39), ζ_1 уменьшает дебаевский член при больших плотностях. Физически это уменьшение связано с тем, что электроны, кинетическая энергия которых меньше или порядка средней энергии взаимодействия, с большой вероятностью захватываются ионами и образуют атомы. Тем самым они не участвуют в дебаевском экранировании. С ростом плотности доля таких электронов растет. При $\gamma \rightarrow 1$ фактически тепловые электроны не участвуют в экранировании, которое осуществляется теперь быстрыми электронами.

В последнее время начато экспериментальное исследование состояния плазмы, в условиях заметной неидеальности. В работе [12] исследовалась цезиевая плазма, образующаяся за фронтом ударной волны. За падающей

волной достигнут диапазон параметров $p = 10 - 30$ атм и $T = 4500 - 7000^\circ \text{K}$, при этом $\gamma \sim 0,4 - 0,8$. Предварительное сопоставление экспериментальных и расчетных данных, проведенное авторами [12], показало заметное (превышающее экспериментальную ошибку) различие между давлением, полученное в рамках трехкомпонентной модели и опытными данными. Последние идут выше расчетных. В этом смысле эксперимент ближе к ситуации, описываемой уравнением (41) и вытекающим из него уравнением состояния.

Все поправки, которые мы до сих пор рассматривали, связаны со взаимодействием заряженных частиц. Оценку вклада в термодинамические величины за счет взаимодействий типа атом — заряд, атом — атом можно провести, используя выражения, приведенные в [9]. Следует отметить, что имеется область параметров (плотностей и температур), где указанные взаимодействия играют еще малую роль, а эффекты, рассмотренные в данной работе, проявляются.

Приложение 1. Поправка к концентрации частиц может быть выражена через одночастичную температурную функцию Грина

$$\Delta n = \frac{1}{\beta V} \sum_{p\omega_n} e^{i\omega_n \tau} G^0 \Sigma G \cong \frac{1}{\beta V} \sum_{p\omega_n} e^{i\omega_n \tau} (G^0)^2 \Sigma |_{\tau \rightarrow +0}, \quad (\text{П.1})$$

где $G^0(p\omega_n)$ — функция Грина свободных частиц; Σ — собственно энергетическая часть или воспользовавшись тем, что $(G^0)^2 = -\partial G^0 / \partial \mu$, перепишем (П.1) в виде

$$\Delta n = -\frac{1}{\beta V} \frac{\partial}{\partial \mu'} \sum_{p\omega_n} e^{i\omega_n \tau} G^0(\mu') \Sigma |_{\mu=\mu'}. \quad (\text{П.2})$$

Если в (П.2) подставить Σ в лестничном приближении, то после некоторых преобразований получим (21).

Приложение 2. Запишем (35) в виде

$$I = \int_0^\infty \frac{dt}{t} e^t (1 - \Phi(\sqrt{t})) - \frac{1}{6} \int_0^\infty \frac{dt}{t} e^{-t} \quad t' \rightarrow 0.$$

Для вычисления первого интеграла воспользуемся соотношением

$$e^{u^2} [1 - \Phi(u)] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx \exp\left(-\frac{x^2}{4} - ux\right),$$

после чего (35) легко доказывается.

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
25 II 1972

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Веденов, А. И. Ларкин. Ж. эксперим. и теор. физ., **36**, 1133, 1959.
2. А. И. Ларкин. Ж. эксперим. и теор. физ., **38**, 1896, 1960.
3. Л. П. Кудрин, Ю. А. Тарасов. Ж. эксперим. и теор. физ., **43**, 1504, 1962.
4. W. Ebeling, Ann. der Phys. **7**, 104, 1967; Physica, **43**, 293, 1969.
5. Ю. Г. Красников. Ж. эксперим. и теор. физ., **53**, 2223, 1967.
6. В. П. Копышев. Ж. эксперим. и теор. физ., **55**, 1304, 1968.
7. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин. Теор. и матем. физика, **8**, 109, 1971.
8. В. А. Алексеев, Е. П. Велихов, Г. Б. Лопанцева. МГД-генераторы, **1**, 17, ИНИ АН СССР, 1967; Electricity from MHD, IAEA, Vienna, 1966.
9. Г. Э. Норман, А. Н. Старостин. Теплофизика высоких температур, **6**, 410, 1968; **8**, 421, 1970.
10. Н. Н. Боголюбов. Успехи физ. наук, **67**, 549, 1959.
11. В. Е. Фортон, Б. Н. Ломакин, Ю. Г. Красников. Теплофизика высоких температур, **9**, 869, 1971.
12. Б. Н. Ломакин, В. Е. Фортон, Ю. Г. Красников. В сб. Физика, техника и применение низкотемпературной плазмы, стр. 110, Алма-Ата, 1970; Докл. III Всес. конф. по физике низкотемпературной плазмы, стр. 123. Изд. МГУ, 1971.