

# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Валуев, Г. Э. Норман, Динамическая модель неидеальной плазмы, *ТВТ*, 1977, том 15, выпуск 1, 191–193

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: 3.238.202.29

10 ноября 2024 г., 18:18:14



14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика. ГИФМЛ, 1963.  
 15. С. Чепмен, Т. Каулинг. Математическая теория неоднородных газов. Изд. иностр. лит., 1960.  
 16. Л. П. Кудрин. Статистическая физика плазмы. Атомиздат, 1974.  
 17. А. Л. Хомкин. Теплофизика высоких температур, 12, 879, 1974.

УДК 533.932

## ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ\*

А. А. Валугев, Г. Э. Норман

В данном сообщении решается задача о последовательном учете квантовых эффектов во взаимодействии заряженных частиц, возникающая при использовании метода молекулярной динамики для исследования электропроводности неидеальной плазмы [1].

Рассматривается невырожденная плазма, где основными являются парные квантовые эффекты [2].

1. Динамический корректирующий множитель для однокомпонентной системы. В теории линейного отклика [3] коэффициент диффузии выражается через автокоррелятор импульсов  $K(t)$ . В квантовой механике

$$K(t) = Z_{\text{кв}}^{-1} \int d^{3N}r \sum_i |\psi_i^{(N)}|^2 e^{-\beta E_i} \sum_k |p_{ik}^{(1)}|^2 \cos \omega_{ik}t. \quad (1)$$

Здесь  $Z_{\text{кв}}$  — статсумма;  $\psi_i^{(N)}$  —  $N$ -частичная волновая функция системы в состоянии  $i$ ;  $E_i$  — соответствующая энергия,  $\beta = 1/kT$ ;  $p_{ik}^{(1)}$  — матричный элемент оператора импульса диффундирующей частицы (для определенности первой), соответствующий переходу между состояниями  $i$  и  $k$ ,  $\omega = \hbar^{-1}(E_i - E_k)$ ,  $t$  — время. Соответствующее классическое выражение имеет вид

$$K_{\text{кл}}(t) = Z_{\text{кл}}^{-1} \int d^{3N}r \int d^{3N}p \exp \left[ -\beta \left( \sum \frac{p_i^2(0)}{2m_i} + \sum U(r_{ij}) \right) \right] p_i(0) p_i(t), \quad (2)$$

где  $Z_{\text{кл}}$  — классическая статсумма;  $m_i$  — масса  $i$ -й частицы;  $U(r_{ij})$  — потенциал межчастичного взаимодействия;  $p_i(0)$  — импульс диффундирующей частицы в нулевой момент времени;  $p_i(t)$  — импульс в момент времени  $t$ , который подчиняется классическому уравнению движения  $dp_i/dt = -\nabla U(r_{ij})$ .

Представим теперь (1) в классической форме (2). Это возможно, если ввести в подынтегральное выражение в (2) корректирующий множитель  $f_N$ . Таким образом, мы представили квантовомеханический автокоррелятор (1) в виде, удобном для расчета методом молекулярной динамики.

Потенциал в показателе больцмановской экспоненты в (2) выбирается в виде термодинамического псевдопотенциала  $\Phi_N$  [2] с тем, чтобы обеспечить равенство классической и квантовомеханической статсумм. Приравнявая подынтегральные функции в (1) и в модифицированном выражении (2), получим определение динамического множителя

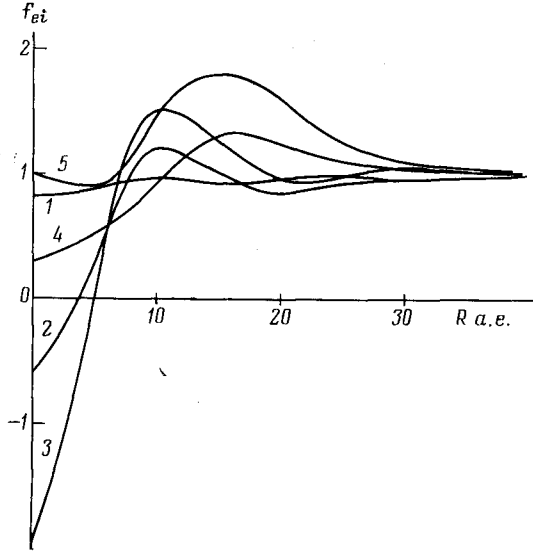
$$\begin{aligned} f_N(1, \dots, N; t, T) \exp[-\beta \Phi_N(1, \dots, N)] \int d^{3N}p \exp \left[ -\beta \sum \frac{p^2(0)}{2m} \right] p_i(0) p_i(t) = \\ = \sum_i |\psi_i^{(N)}|^2 e^{-\beta E_i} \sum_k |p_{ik}^{(1)}|^2 \cos \omega_{ik}t. \end{aligned} \quad (3)$$

Таким образом,  $f_N$  зависит от положения частиц в нулевой момент, от времени и температуры. Заметим, что при решении классических уравнений движения в (3) имеется некоторый произвол в выборе потенциала взаимодействия. При этом чем удачней он выбран, тем меньше будет отличаться от единицы множитель  $f_N$ , но, по-видимому, его никоим образом нельзя сделать тождественно равным единице.

\* Материалы настоящего сообщения доложены на научной сессии по вопросу «Исследования плотной плазмы», проведенной 8–9 июня 1976 г. секцией низкотемпературной плазмы Научного Совета АН СССР по комплексной проблеме «Теплофизика».

При решении классических уравнений движения с учетом множителя (3) следует иметь в виду, что эквивалентность классической и квантовомеханической задач достигается для средних по ансамблю величин. Детали же микроскопической картины, такие как, например, траектории частиц, их распределение по скоростям носят до некоторой степени фиктивный характер.

Для классического автокоррелятора скоростей с квантовым множителем нами была развита теория возмущений, которая использует результаты [4] и позволяет разложить  $K(t)$  в ряд, каждый последующий член которого учитывает многочас-



Динамический электрон-ионный парный множитель для  $T=10^4$  °К: 1 —  $t=0$ ; 2 —  $t=50$  a.e.; 3 — 100; 4 — 150; 5 — 200 (1 a.e. =  $2,42 \cdot 10^{-17}$  сек)

точные квантовые эффекты все более высокого порядка. Главный член этого ряда учитывает только парные квантовые эффекты и имеет вид

$$K_0(t) = Z^{-1} \int d^{3N}r \int d^{3N}p \exp \left[ -\beta \left( \sum \frac{p^2(0)}{2m} + \sum \Phi_2 \right) \right] p_1(0) p_1(t) \prod_{i=2}^N f_2(1, i; t, T). \quad (4)$$

Здесь  $\Phi_2$  — парный термодинамический псевдопотенциал,  $f_2$  — парный динамический множитель. Выражение (4) и является формулировкой динамической модели системы (применительно к расчету коэффициента диффузии).

2. *Неидеальная плазма.* Развитый подход можно распространить на двухкомпонентную систему, в том числе на неидеальную плазму. Однако здесь возникает трудность, обусловленная необходимостью учета связанных состояний электронов и ионов. Здесь эта трудность решалась аналогично [2], т.е. суммирование в (3) в парной электрон-ионной задаче начиналось с уровней, соответствующих энергии  $\sim -kT$ . Правая часть (3) рассчитывалась по известным водородным волновым функциям, уровням энергии и матричным элементам импульсов [5]. Классическое уравнение движения в левой части (3) решалось с термодинамическим парным псевдопотенциалом  $\Phi_{ei}$ .

На рисунке представлен парный динамический множитель для  $T=10^4$  °К. На близких расстояниях  $f_{ei}$  наиболее сильно отличается от единицы. При  $R \approx 30$  a.e.  $f_{ei}$  практически равна единице для всех значений  $t$ . Зависимость  $f_{ei}$  от времени носит колебательный характер с некоторой тенденцией к увеличению размаха колебаний. Это связано с увеличением несоответствия между решениями классической и квантовомеханической задач при больших временах. Проведены также расчеты  $f_{ei}$  при  $T$ , равной 5000 и 20 000° К. При уменьшении температуры увеличиваются отклонения  $f_{ei}$  от единицы и расстояния, при которых  $f_{ei} \approx 1$ .

При расчете коэффициента диффузии методом молекулярной динамики принимается следующая модель. Электроны и ионы взаимодействуют по упомянутому выше закону, чтобы не искажались термодинамические свойства системы. Заряды одного знака взаимодействуют по кулоновскому потенциалу. Учет парных динамических множителей приводит к нарушению существующей в модели [1] (где  $f_{ei} \equiv 1$ ) универсальной зависимости приведенного коэффициента диффузии от параметра неидеальности  $\gamma$ . Появится расхождение результатов по температуре и давлению.

Однако это расслоение не должно быть значительным, так как расстояния, на которых  $f_{ei}$  заметно отличается от единицы, в несколько раз меньше среднего расстояния между частицами при  $\gamma \leq 1$  и не вносят заметного вклада во взаимодействие.

Институт высоких температур  
Академии наук СССР

Поступило в редакцию  
28 VI 1976

## ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Валуев, Г. Э. Норман. В сб. Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике (под ред. Г. И. Марчука), Новосибирск, 1974, стр. 268.
2. Б. В. Зеленер, Г. Э. Норман, В. С. Филинов. Теплофизика высоких температур, 10, 1160, 1972; 13, 712, 913, 1975.
3. Д. Н. Зубарев. Неравновесная статистическая термодинамика. «Наука», 1971.
4. Б. В. Зеленер. Тез. докл. X Всес. конф. по физике жидкого состояния вещества. Изд. Самаркандск. ун-та, Самарканд, 1974, стр. 135.
5. Г. Бете, Э. Соллнер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, 1960.

УДК 533.932

## К ТЕОРИИ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЫ \*

Г. А. Кобзев, Ю. К. Куриленков, Г. Э. Норман

Спектры фоторекомбинационного излучения и фотоионизационного поглощения рассмотрены в [1] для идеальной плазмы. В данном сообщении обсуждается изменение этих спектров с увеличением плотности плазмы.

1. При вычислении оптических свойств слабонеидеальной плазмы обычно учитывается один механизм влияния неидеальности: слияние верхних членов спектральных серий, приводящее к кажущемуся сдвигу порога фотоионизации [1, 2]. Обозначим через  $n_1$  эффективное главное квантовое число уровня, отвечающего последней наблюдаемой линии.

Обратим внимание на другое возможное проявление неидеальности — нереализацию части верхних уровней атомов и ионов в результате действия микрополей в плазме. Обозначим через  $n_2'$  эффективное главное квантовое число последнего реализующегося уровня. Значение  $n_2'$  можно найти, приравняв энергию этого уровня снижению потенциального барьера  $\Delta E = 2e\sqrt{eF}$  атома в электрическом микрополе напряженности  $F$ ,  $e$  — заряд электрона. Другой причиной нереализации уровней является ограничение числа уровней в дебаевском поле (квантовое число последнего реализующегося уровня обозначим через  $n_2''$ ).

На рис. 1, а показаны области параметров плазмы, где преобладает один из указанных выше факторов. Область 1 соответствует слиянию линий, здесь  $n_1 = \min(n_1, n_2', n_2'')$ , область 2 — нереализации уровней, причем в 2' это происходит за счет действия микрополей плазмы, т. е.  $n_2' = \min(n_1, n_2', n_2'')$ , а в 2'' — из-за дебаевского экранирования,  $n_2'' = \min(n_1, n_2', n_2'')$  \*\*. Фактически границам между областями соответствуют не линии, а некоторые интервалы параметров.

2. В области 1 сечение фотоионизации может быть продолжено в длинноволновую область в соответствии с невозмущенной плотностью сил осцилляторов  $df/dE$  ([2], рис. 1, б). Это допущение является распространением принципа спектроскопической устойчивости на слившиеся высшие члены спектральных серий.

Ситуация коренным образом изменяется при переходе в область 2. Вследствие короткодействующего характера реального потенциала взаимодействия в плазме пороговое значение  $df/dE$  должно обратиться в нуль в соответствии с законом  $k^{2l+1}$ ,

\* Материалы настоящего сообщения доложены на научной сессии по вопросу «Исследования плотной плазмы», проведенной 8–9 июня 1976 года секцией низкотемпературной плазмы Научного Совета АН СССР по комплексной проблеме «Теплофизика».

\*\* Область 2'' возникает при формальном сравнении  $n_1, n_2', n_2''$  для всех  $n$  и  $T$ ; при этом для нее оказалось  $\gamma > 1$ , т. е. дебаевское приближение здесь физически необосновано.