

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин, Электрон-ионные коррелированные пары в плазме и их влияние на электропроводность,
ТВТ, 1977, том 15, выпуск 1, 188–191

<https://www.mathnet.ru/tvt8122>

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

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

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.87

16 мая 2025 г., 02:44:58



в частности, его термодинамические свойства в очень широком диапазоне состояний — от плазмы до сжатого твердого тела.

Институт прикладной математики
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
28 VI 1976

ЛИТЕРАТУРА

1. Д. А. Киржниц, Ю. Е. Лозовик, Г. В. Шпагаковская. Успехи физ. наук, 117, 3, 1975.
2. А. И. Воронинов, Г. М. Гандельман, В. Г. Подвальный. Успехи физ. наук, 100, 193, 1970.
3. R. I. Weiss. X-ray Determination of Electron Distribution, Amsterdam, North-Holland, 1966.
4. В. Е. Форгов, Б. Н. Ломакин, Ю. Г. Красников. Теплофизика высоких температур, 9, 869, 1971.
5. Л. В. Альтшулер, А. А. Баканова. Успехи физ. наук, 96, 193, 1968.

УДК 533.932

ЭЛЕКТРОН-ИОННЫЕ КОРРЕЛИРОВАННЫЕ ПАРЫ В ПЛАЗМЕ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ *

В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин

В кинетической теории плазмы [1] традиционно большое внимание уделялось коллективным эффектам. Линейные по плазменному параметру α ($\alpha = \beta e^2 / r_D$; β — обратная температура, r_D — дебаевский радиус) поправки к формуле Спитцера были получены в работе Б. Б. Кадомцева [2], а затем в [3, 4]. Учет парных корреляций ограничивался рассмотрением лишь электрон-ионных связанных состояний — атомов. Однако парное взаимодействие приводит к появлению коррелированных пар как с отрицательной, так и с положительной энергией относительного движения (состояний рассеяния). Учет последних в кинетике является сложной задачей, однако при определенных условиях удается учесть состояния рассеяния при расчете кинетических коэффициентов. Так, например, авторы [5] воспользовались хорошо известным в теории рассеяния [6] эффектом задержки: при рассеянии частиц друг на друге время пролета области действия сил может оказаться значительно больше времени пролета этой области без взаимодействия. В этом случае можно говорить об образовании столкновительного комплекса [7] (СК). СК соответствует двум атомам, находящимся в окрестности точки поворота траектории рассеяния. Концентрация их определяется вкладом состояний непрерывного спектра во второй вириальный коэффициент [7], а время жизни — $\tau_{СК}$ — временем задержки Вигнера [6, 7].

В кинетике плазмы СК не рассматривались. В данной работе исследуются электрон-ионные пары в плазме с произвольной энергией относительного движения. Рассчитана электропроводность с учетом этих пар. Проводится сопоставление с экспериментами в плазме Ag [8–10], Cs [11], Xe [12].

Нас будут интересовать электрон-ионные пары, слабо взаимодействующие с окружением. Такими парами в первую очередь являются электрон — ближайший ион. Размер этих пар фактически не превосходит среднего расстояния между зарядами $r_{ср}$ (в дальнейшем используется параметр $\gamma = \beta e^2 / r_{ср}$; $8\gamma^2 = \alpha^2$). Запишем классическое выражение для плотности их внутренних состояний, используя приближение ближайшего соседа (ПБС) [13] (вычисления проводились в большом каноническом ансамбле)

$$g(E) = z_i \int dp dR F(R) [\delta(E - p^2/2m + e^2/R) - \delta(E - p^2/2m)] / (2\pi\hbar)^3. \quad (1)$$

Здесь $F(R) = \exp[-4\pi R^3(z_e + z_i)/3]$ — плотность вероятности события: электрон и ближайшая частица ион находятся на расстоянии R друг от друга; p и m — импульс и приведенная масса относительного движения; z_e и z_i — активности.

Характер относительного движения частиц в паре в зависимости от энергии меняется радикальным образом. Меняется также в зависимости от размера пары характер взаимодействия с третьей частицей. Целесообразно поэтому провести более детальную классификацию пар. Выделим четыре характерные группы (рис. 1).

Атомы (А) — состояния с большими отрицательными энергиями $E < -\beta^{-1}$. Концентрация их определяется соответствующим интегралом от плотности состояний (1). Следует отметить, что размер таких атомов не превосходит амплитуды кулоновского рассеяния $\sim \beta e^2$. Поэтому рассеяние тепловых электронов на них можно рассматривать как на одной частице.

* 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».

Возбужденные атомы (ВА) — состояния с энергиями $-\beta^{-1} < E < -e^2/r_{ср}$. Размер их превосходит амплитуду кулоновского рассеяния, но меньше среднего межчастичного расстояния. В отличие от предыдущего случая рассеяние электрона на них приближенно можно рассматривать как рассеяние на кулоновском центре [14].

Квазисвязанные состояния (КС) — $e^2/r_{ср} < E < 0$. Это состояния с размером водородной орбиты $> r_{ср}$. Движение электрона поэтому осуществляется лишь по кусочку эллиптической орбиты в поле одного ближайшего иона, затем электрон переходит в поле другого и т. д. В этом смысле движение электрона инфинитно, хотя его энергия отрицательна. Рассеяние электрона на КС происходит как на кулоновском центре.

Столкновительные комплексы (СК) — состояния с $E > 0$. В отличие от предыдущего случая это электроны, движущиеся в поле иона по кусочкам гиперболической орбиты, после чего происходит смена ближайшего соседа. С ростом энергии переход с одного участка гиперболы на другой разделяется растущим участком свободного движения по прямой.

СК и КС — нестабильные образования, их проявление в кинетических процессах зависит от соотношения характерных времен. Оценим $\tau_{СК}$ из соотношения $\tau_{СК} \sim \sqrt{\sigma(\epsilon)}/v(\epsilon)$; $\epsilon = \beta E$, где $\sigma(\epsilon) = (\beta e^2)^2/\epsilon^2$ — сечение рассеяния электрона на ионе и $v(\epsilon) = v_T \sqrt{\epsilon}$ (v_T — тепловая скорость). Для $\tau_{СК}$ получим $\tau_{СК} = \beta e^2/v_T \epsilon^{3/2}$. В рамках ПБС $\tau_{СК}$ при $E=0$ конечно и равно $\tau_{СК}^0 = \beta e^2/v_T \gamma^{3/2}$. Времена жизни КС близки к этой величине.

Сопоставим найденные времена с характерными плазменными: $\tau_{ст} = \beta e^2/v_T$ — время столкновения теплового электрона и иона и $\tau_{пр} = 1/n_e (\beta e^2)^2 v_T \ln \lambda$ — время пролета между столкновениями [1]. Так как характерная энергия пары $\epsilon \sim \gamma$, то при $\gamma < 1$ имеют место неравенства

$$\tau_{СК}/\tau_{ст} \sim \gamma^{-3/2} > 1; \quad \tau_{СК}/\tau_{пр} \sim \gamma^{3/2} \ln \lambda < 1; \quad (2)$$

Первое неравенство означает, что столкновение теплового электрона и СК можно рассматривать как парное (подобно столкновению электрона с возбужденным атомом). Второе неравенство характеризует вклад в электропроводность электронов из КС и СК (столкновительный перенос [15]).

Проведем расчет электропроводности, приняв во внимание атомы, возбужденные атомы, КС и СК. Все концентрации параметрически зависят от активностей, поэтому, используя, например, связь последней с уравнением состояния [16], можно выразить интересующие нас величины через давление и температуру, измеряемые в эксперименте.

В постоянном электрическом поле вклад в электропроводность дадут как свободные заряды n_e , так и КС и СК. Рассчитаем вклад n_e по формуле типа Фроста, приняв во внимание столкновения электронов с ионами, А, ВА, КС и СК

$$\sigma_e = \sigma_{сн} \frac{n_e}{n_i + n^*} \frac{1}{6} \int_0^\infty \frac{e^3 \exp(-\epsilon) d\epsilon}{1 + n_A \sigma_{ea}(\epsilon) \zeta / (n_i + n^*) \sigma_{ei}(\epsilon)}, \quad (3)$$

где $\sigma_{сн} = 1,48/\sqrt{2\pi m \beta^3} e^2 \ln \lambda$; $n^* = n_{ВА} + n_{КС} + n_{СК}$; $\zeta = 0,582$.

Выражения для $\sigma_{ea}(\epsilon)$ и $\sigma_{ei}(\epsilon)$ можно найти в [17]. Из (3) следует, что в пределе высоких температур ($n_A/n_i \sim \beta^{3/2} \rightarrow 0$) плотностная поправка к $\sigma_{сн}$ связана с рассеянием электронов на ВА, КС и СК

$$\sigma_e \rightarrow \sigma_{сн} n_e / (n_i + n^*) = \sigma_{сн} (1 - 0,47 \alpha^{2/3} - 0,325 \alpha^{1/3}). \quad (4)$$

В отличие от случая свободного движения электрон, находящийся в квазисвязанном состоянии или СК «помнит» о своем первоначальном импульсе, пока он находится в поле одного ближайшего иона. При смене ближайшего соседа корреляция между значениями импульса нарушается. Поэтому время, в течение которого электрон может воспринимать импульс от поля, определяется временем жизни пары $\tau_{СК}$. Оценим вклад таких электронов в электропроводность (столкновительный перенос) по соотношению

$$\Delta \sigma = e^2 \tau_{СК}^0 (n_{КС} + n_{СК}) / m = (0,11 \alpha^{1/3} + 0,08 \alpha^{2/3}) \sigma_{сн} / \ln \lambda. \quad (5)$$

Из (4) и (5) следует, что при $\alpha < 1$ поправка к электропроводности за счет собственного переноса квазисвязанных состояний и СК оказывается фактически поправкой

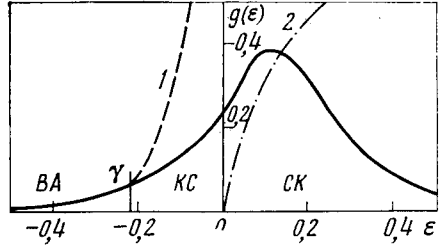


Рис. 1. Плотность внутренних состояний электрон-ионных пар $g(\epsilon)$ для $\alpha=0,1$ (по (1)): 1 — плотность состояний изолированного атома ($g(\epsilon) = \pi \alpha^2/32 |\epsilon|^{3/2}$), 2 — плотность состояний свободных электронов $g(\epsilon) = \sqrt{\epsilon}$

второго порядка малости ($\sim \alpha^{5/3}$) по отношению к поправке, связанной с рассеянием электронов проводимости на этих состояниях ($\sim \alpha^{2/3}$).

На рис. 2 нанесены результаты экспериментов [8–10] по измерению электропроводности частично ионизированной плазмы Ar в импульсном разряде высокого давления. Кривая 6 на рис. 2 построена с учетом КС и СК (расчет по (3)), и, как видно, хорошо согласуется с экспериментальными данными во всем диапазоне температур. Вклад столкновительного переноса $\Delta\sigma$ несуществен в этих условиях.

Интересно провести сравнение с экспериментами в плазме с высокой степенью ионизации [11, 12] (рис. 3). Расчет по (4) удовлетворительно описывает экспериментальные данные при $\alpha < 1$. В области $\alpha > 1$ он носит, естественно, экстраполя-

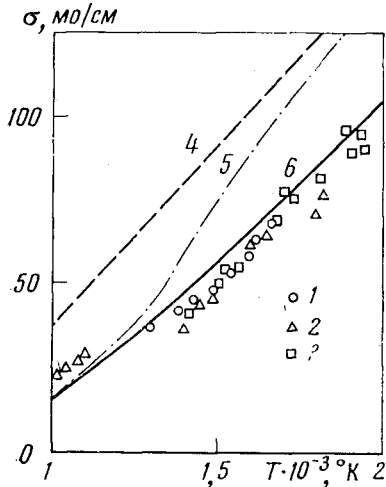


Рис. 2

Рис. 2. Электропроводность плазмы аргона: эксперимент: 1 — [8], 2 — [9], 3 — [10]. Теория: 4 — по Спитцеру; 5 — учтены столкновения с атомами [17]; 6 — расчет по формуле (3) с учетом КС и СК

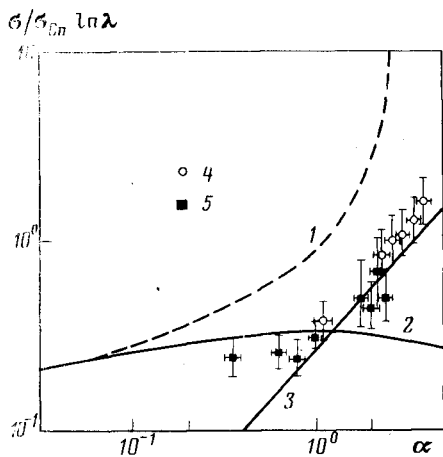


Рис. 3

Рис. 3. Безразмерная электропроводность плазмы цезия и ксенона. Теория: 1 — по Спитцеру; 2 — вклад свободных электронов по (4); 3 — вклад столкновительного переноса по (5). Эксперимент: 4 — [11], 5 — [12]

ционный характер, так как здесь станут существенными поправки, полученные в [2–4]. Важно, однако, отметить, что вклад переноса свободных электронов в электропроводность при этом оказывается несущественным. На первый план выходит столкновительный перенос (кривая 3), который дает разумную количественную оценку для величины электропроводности. Заметим, что столкновительный перенос является основным механизмом переноса в плотных газах и жидкостях [15].

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
28 VI 1976

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. Л. Климонтович. Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы. «Наука», 1975.
2. Б. Б. Кадомцев. Ж. эксперим. и теор. физ., 33, 151, 1957.
3. Ю. Л. Климонтович, В. Эбелинг. Ж. эксперим. и теор. физ., 63, 905, 1972.
4. А. С. Каклюгин, Г. Э. Норман. Теплофизика высоких температур, 11, 238, 1973.
5. S. Kim, J. Ross. J. Chem. Phys., 42, 263, 1965.
6. М. Гольдбергер, К. Ватсон. Теория столкновений. «Мир», 1967.
7. Ф. Смит. В сб. Кинетические процессы в газах и плазме (под ред. А. Хохштира). Атомиздат, 1972, стр. 277.
8. А. А. Бакеев, Р. Е. Ровинский. Теплофизика высоких температур, 8, 207, 1121, 1970.
9. М. М. Поповић, S. S. Поповић, S. M. Vucoviћ. Fisica, 6, 29, 1974.
10. K. Günter, R. Radtke. Beitr. Plasmaphys., 15, 299, 1975.
11. В. А. Сеченов, Э. С. Сон, О. Е. Щеголов. Письма ЖТФ, 1, 891, 1976.
12. Ю. В. Иванов, В. Б. Минцев, А. Н. Дремин, В. Б. Фортов. Письма ЖТФ, 2, 1976.
13. В. С. Воробьев, А. Л. Хомкин. Теоретическая и математическая физика, 26, № 3, 1976.

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 Φ_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».