

# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Л. Хомкин, Квазисвязанные электронные состояния и их локализация в плазме с сильным кулоновским взаимодействием,  
*ТВТ*, 1981, том 19, выпуск 4, 673–679

<https://www.mathnet.ru/tvt8446>

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: 18.97.9.175

14 мая 2025 г., 05:57:51



УДК 533.932

КВАЗИСВЯЗАННЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ  
И ИХ ЛОКАЛИЗАЦИЯ В ПЛАЗМЕ С СИЛЬНЫМ  
КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ*Хожкин А. Л.*

С целью дальнейшего исследования свойств слабосвязанных электрон-ионных состояний [1] применительно к атомарной плазме в данной работе решается задача о распределении свободных электронов по элементарным ячейкам. Определены равновесные количества пустых ячеек и ячеек с одним, двумя и тремя электронами. Исследован вопрос о локализации части свободных электронов в элементарной ячейке. Предложен эффективный потенциал взаимодействия электрона с ионом в плазме с существенной кулоновской неидеальностью, на основе которого обсуждаются оптические эксперименты в плотной плазме.

1. Кулоновское взаимодействие свободных электронов и ионов в низкотемпературной атомарной плазме приводит к снижению потенциала ионизации связанных состояний. В результате число свободных электронов и ионов увеличивается по сравнению с расчетом в рамках идеально газового приближения [2]. Традиционно считалось, что все образовавшиеся за счет снижения потенциала ионизации заряженные частицы также являются свободными.

В работе [1] показано, что в результате взаимодействия в непрерывном спектре возникают слабосвязанные электрон-ионные пары, которые выделены в отдельную группу — СК (столкновительные комплексы) и КС (квазисвязанные) состояния в дополнение к традиционно рассматриваемым свободным и связанным состояниям. Соответствующие интервалы энергий указаны на рис. 1. При этом фактически предполагалось, что эти состояния формируются следующим образом: электрон взаимодействует с данным ионом до тех пор, пока его траектория лежит в пределах сферы радиуса  $r_0$ , который определяется соотношением  $4/3\pi r_0^3 n_i = 1$  ( $n_i$  — плотность свободных ионов). В дальнейшем сферу радиуса  $r_0$  вокруг иона будем называть элементарной ячейкой (ЭЯ). На последующем участке траектории происходит смена ближайшего соседа — электрон переходит в соседнюю элементарную ячейку. Схематически траектория электронов из КС- и СК-состояний изображена на рис. 2 [3].

Недавние эксперименты по измерению оптических характеристик плазмы с заметной кулоновской неидеальностью (см. [4] и имеющиеся

там ссылки) вновь привлекли внимание к электрон-ионным состояниям с малой энергией связи. В работе [4] для объяснения оптических экспериментов выдвинуто предположение о нереализации (исчезновении) части электронных состояний, причем важно подчеркнуть, что эта «нереализация» не компенсируется, как традиционно считалось, соответствующим вкладом состояний непрерывного спектра при расчете коэффициента непрерывного поглощения плазмы. В ряде экспериментов отмечается также исчезновение линий вблизи рекомбинационного порога при отсутствии заметного сдвига последнего. В рамках предлагаемой классификации в обоих случаях речь идет о КС-состояниях.

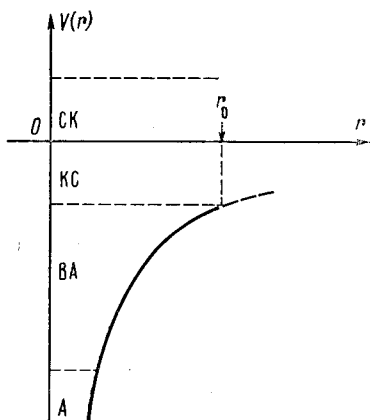


Рис. 1. Кулоновский потенциал взаимодействия и характерные интервалы энергий, соответствующие: атомам (А), возбужденным атомам (ВА), квазисвязанным состояниям (КС), столкновительным комплексам (СК)

При расчете плотности КС-состояний [2] пренебрегалось взаимодействием образованной электрон-ионной пары с окружающими частицами, что оправдано в силу ее электронейтральности. Пренебрегалось также взаимодействием электрона в КС-состоянии с ближайшим электроном, что оправдывалось маловероятностью такого события (фактически тройное столкновение) в слабонеидеальной плазме. Вместе с тем рассмотрение на рис. 2, а показывает, что траектория электрона, находящегося в КС-состоянии, может радикально измениться, если ЭЯ, в которую переходит электрон из данной, будет содержать один или несколько электронов. Здесь возможен возврат электрона в первоначальную ячейку за счет электрон-электронного отталкивания. Иными словами, траектория электрона с малой энергией связи (КС-состояние), находящегося в данной ячейке, должна существенно зависеть от наличия

электронов в окружающих его элементарных ячейках.

С целью дальнейшего исследования свойств КС- и СК-состояний в предлагаемой работе рассматривается задача о равновесном распределении электронов по элементарным ячейкам. Определены вероятности того, что элементарная ячейка не содержит электрон, содержит один, два, три электрона (ЭЯ — сфера радиуса  $r_0$  с ионом в центре). Рассмотрены изменения средней энергии электрона при переходе из ячейки в ячейку. Исследован вопрос о локализации электронов из интервала КС внутри ЭЯ. Предложен эффективный потенциал взаимодействия электрона с ионом в плазме с существенной кулоновской неидеальностью, на основе которого выполнены качественные оценки числа КС-состояний применительно к эксперименту [5].

2. Рассмотрим классическую систему  $N_e$  ( $n_e = N_e/V$ ) свободных электронов и  $N_i$  ( $n_i = N_i/V$ ) ионов, находящихся в объеме  $V$ , при температуре  $T \equiv 1/\beta$ . Предполагается, что тем или иным способом выделена атомарная компонента (связанные состояния). Например, эту процедуру можно осуществить в рамках метода псевдопотенциала [6]. Мысленно окружим каждый ион сферой радиуса  $r_0$ , который, как уже указывалось, определяется соотношением  $4/3\pi r_0^3 n_i = 1$ . Таким образом, исследуемый объем будет состоять из  $N_i$  элементарных ячеек объемом  $v_0 = 4/3\pi r_0^3$ . В дальнейшем считаем ионы неподвижными, что оправдано в силу  $m_i/m_e \gg 1$  ( $m_{i,e}$  — масса иона и электрона соответственно).

В данной работе решается задача об определении равновесного распределения  $N_e$  электронов по  $N_i$  элементарным ячейкам, т. е. в определении среднего числа ЭЯ, не содержащих электронов  $N_0$ , числа ЭЯ с одним электроном  $N_1$  и т. д. ( $N_2, N_3, \dots$ ).

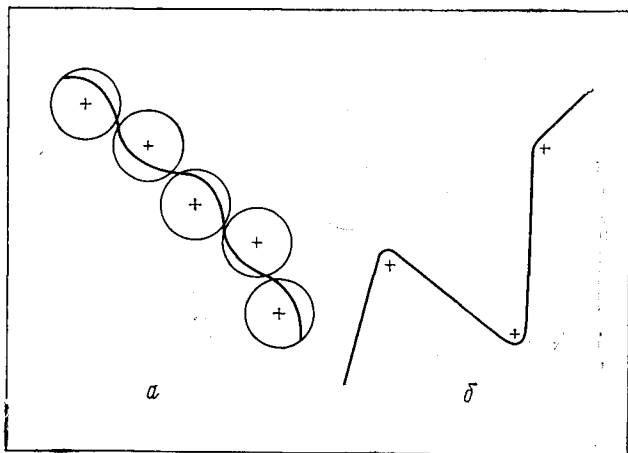


Рис. 2. Траектории электрона: *a* – с малой, *б* – с большой положительной энергией

В идеальном газе решение такой задачи хорошо известно и описывается формулой Пуассона

$$N_k/N = p_k = (n_e v)^k \exp(-n_e v)/k! \quad (1)$$

Для ЭЯ, согласно (1), доли пустых ячеек и ячеек с одним электроном равны  $p_0 = p_1 = e^{-1} = 0,37$ . Несколько меньше ячеек с двумя электронами  $p_2 = 0,18$  и т. д. Для определения средних значений  $N_k$  в системе с взаимодействием необходимо найти минимум свободной энергии системы  $N_e$ -взаимодействующих электронов при фиксированном положении ионов, записанной для произвольного распределения электронов по ячейкам. При этом сделаем следующие допущения.

1) Ограничимся рассмотрением лишь пустых ячеек и ячеек с одним, двумя и тремя электронами. Это оправдано тем, что даже в идеальном газе, в соответствии с (1), доля ячеек с четырьмя и более электронами невелика, причем с ростом плотности, как будет видно из дальнейшего, доля ячеек с  $k \geq 2$  уменьшается.

2) Пренебрежем взаимодействием между ячейками. Вклад в свободную энергию от взаимодействия между ячейками будет оценен в разделе 3а с использованием полученных результатов.

3) При записи энергии взаимодействия электронов внутри ячейки будем считать, что средняя энергия, приходящаяся на одну электрон-электронную связь  $\bar{u}_{ee}$ , совпадает со средней энергией электрон-ионного взаимодействия  $\bar{u}_{ei}$ :  $|\bar{u}_{ee}| = |\bar{u}_{ei}| = u = e^2/r_0$ . Это равенство имеет место для слабо-неидеальной плазмы ( $\beta e^2/r_0 < 1$ ). Для упрощения задачи предположим, что данное равенство справедливо для неидеальной ( $\beta e^2/r_0 > 1$ ) плазмы.

В результате для свободной энергии имеем

$$\beta F = \sum_{k=0}^3 \left\{ -\beta u k + \beta u \frac{k(k-1)}{2} \right\} N_k + \ln W \{N_k\}. \quad (2)$$

В фигурных скобках записана энергия взаимодействия  $k$ -электронов в ЭЯ. Первое слагаемое соответствует взаимодействию  $k$ -электронов с центральным ионом, второе – взаимодействию  $k$ -электронов между собой,  $N_k$  – число ЭЯ с  $k$ -электронами.

Второе слагаемое в (2) – энтропия данного распределения, т. е. логарифм числа размещений  $N_e$  электронов по  $N_i$ -ячейкам. Полное число таких размещений равно  $N_e!$ , но среди них есть тождественные, соответствующие перестановкам электронов внутри ячейки и перестановкам

электронов между  $N_k$  одинаковыми ячейками. Таким образом, искомое число конфигураций определяется выражением [7]

$$W\{N_k\} = \frac{N_e!}{(0!)^{N_0}(1!)^{N_1}(2!)^{N_2}(3!)^{N_3}N_0!N_1!N_2!N_3!} \quad (3)$$

Как уже отмечалось, величины  $N_k$  не являются независимыми, поскольку число электронов и ионов (ячеек) фиксировано

$$\sum_{k=0}^3 N_k = N_i, \quad \sum_{k=0}^3 kN_k = N_e. \quad (4)$$

Для нахождения средних (наивероятнейших) значений  $N_k$  необходимо найти минимум  $\beta F = \beta F - \lambda_e N_e - \lambda_i N_i$ . Из условия  $\partial F / \partial N_k = 0$  находим

$$N_0 = \exp \lambda_i, \quad N_1 = \exp (\beta u + \lambda_e + \lambda_i), \quad N_2 = \exp (\beta u + 2\lambda_e + \lambda_i) / 2!, \quad N_3 = \exp (3\lambda_e + \lambda_i) / 3! \quad (5)$$

Подставляя найденные  $N_k$  в условие (4) и переходя к новым переменным  $\gamma = \beta u$ ,  $y = \exp \lambda_i$ ,  $x = \exp \lambda_e$ , получим

$$N_i = y(1 + xe^{\gamma} + \frac{1}{2}x^2e^{2\gamma} + \frac{1}{6}x^3e^{3\gamma}), \quad N_e = yxe^{\gamma}(1 + x + \frac{1}{2}x^2). \quad (6)$$

Исключая  $y$  и используя  $N_e = N_i$  для определения  $x$ , имеем уравнение

$$2x^3e^{\gamma} + 3x^2e^{2\gamma} - 6 = 0. \quad (7)$$

Кубическое уравнение (7) решается приближенно с помощью подстановки

$$x = \sqrt{2e^{-\gamma}}(1 + \Delta). \quad (8)$$

Представление (8) фактически оправдано тем, что задача о нахождении  $N_k$  может быть решена точно в случае  $k=0, 1, 2$ . Величина  $\Delta$  — малая поправка к этому решению.

В линейном приближении по  $\Delta$

$$\Delta = -\sqrt{2}/3(\sqrt{2} + \sqrt{e^{\gamma}}).$$

Нетрудно видеть, что при всех  $\gamma$  величина  $|\Delta| \ll 1/3$ , что оправдывает процедуру (8).

Окончательно для искомых величин  $p_k = N_k/N$  получим

$$p_0 = \left[ 2 + \sqrt{2e^{\gamma}} + \frac{\sqrt{2}}{3} e^{-\gamma/2} + \Delta (\sqrt{2e^{\gamma}} + 2 + \sqrt{2e^{-\gamma}}) \right]^{-1}, \quad (9)$$

$$p_1 = p_0 \sqrt{2e^{\gamma}}(1 + \Delta), \quad (10)$$

$$p_2 = p_0(1 + \Delta)^2, \quad (11)$$

$$p_3 = p_0 \frac{\sqrt{2}}{3} e^{-3\gamma/2} (1 + \Delta)^3. \quad (12)$$

**За.** Обсудим зависимости  $p_k$  от параметра  $\gamma$ . При  $\gamma \rightarrow 0$   $p_0 \rightarrow 0,34$  (0,37);  $p_1 \rightarrow 0,39$  (0,37);  $p_2 \rightarrow 0,22$  (0,18);  $p_3 \rightarrow 0,08$  (0,06). В скобках указаны значения  $p_k$ , даваемые формулой Пуассона (1). Некоторое отличие этих величин связано с пренебрежением вклада в свободную энергию ячеек с  $k > 3$ . На рис. 3 нанесены зависимости  $p_k(\gamma)$ . С ростом параметра  $\gamma$  все  $p_k$  стремятся к нулю, исключая  $p_1$ . Такое поведение  $p_k$  показывает, что с ростом параметра  $\gamma$  электроны стремятся распределиться по одному в ячейке, при этом доля пустых ячеек и ячеек с  $k=2, 3$  уменьшается.

На рис. 3 пунктиром нанесена зависимость  $p_0(\gamma)$ , полученная при учете ячеек лишь с  $k=0, 1, 2$ . Расхождение с расчетом при учете ячеек с  $k=0, 1, 2, 3$  невелико и уменьшается с ростом  $\gamma$ . Аналогичная картина имеет место и для других  $p_k$ .

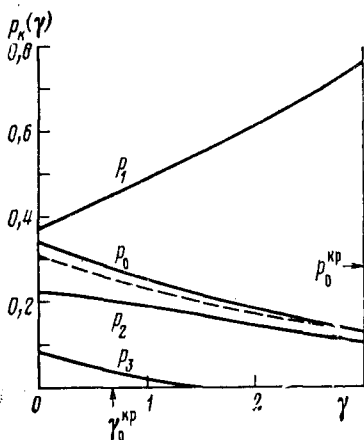


Рис. 3

Рис. 3. Относительные концентрации ячеек в плазме

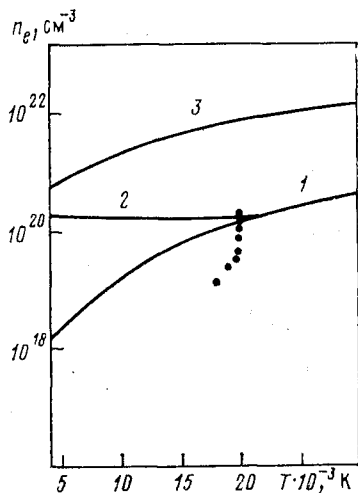


Рис. 4

Рис. 4.  $n_e$ - $T$ -диаграмма: точки - эксперимент, [5]; кривые 1, 2, 3 соответствуют соотношениям  $\gamma = \gamma_0^{KP}$ ,  $M=1$ ,  $n_e \lambda_e^3 = 1$

Оценим вклад в свободную энергию, обусловленный взаимодействием между ячейками. Поскольку ячейка с одним электроном нейтральна, то в первую очередь следует учесть взаимодействие пустых ячеек между собой и с ячейками с двумя и тремя электронами. Соответствующие вклады в свободную энергию имеют вид

$$\Delta F_{00} \sim p_0 p_0 (u p_0^{1/2}), \quad \Delta F_{02} \sim -p_0 p_2 (u p_0^{1/2}), \quad \Delta F_{03} \sim -p_0 p_3 (2u p_0^{1/2}).$$

В скобках записана средняя энергия взаимодействия между ячейками с учетом того, что среднее расстояние между взаимодействующими ячейками определяется средним расстоянием между пустыми ячейками, поскольку  $N_0 > N_2, N_3$ . (Расстояние же между пустыми ячейками в  $p_0^{-1/3}$  раз больше  $r_0$ ). Сравнивая максимальное слагаемое в  $\Delta F \sim p_0 p_0 (u p_0^{1/2})$  с наименьшим слагаемым в (2)  $\sim p_2 u$ , получим для их отношения  $p_0^{3/2} / (1 + \Delta)^2$ . При  $\gamma=0$  это отношение равно 0,36, но уменьшается с ростом  $\gamma$  и при  $\gamma=1$  составляет 0,2. Как и следовало ожидать, взаимодействие между ячейками дает наибольший вклад при  $\gamma \rightarrow 0$ . Для рассматриваемой задачи важно, что с ростом  $\gamma$  роль этого взаимодействия становится несущественной.

36. Рассмотрим, как меняется энергия системы при переходе электрона из ячейки в ячейку. Будем обозначать электронный переход, указывая начальный и конечный тип ячеек. Рассмотрим переход из ячейки с одним электроном в пустую ячейку:  $(1-0) \rightarrow (0-1)$ . Очевидно, что при таком переходе средняя энергия не меняется, и он возможен для электрона с любой кинетической энергией. Для перехода в занятую ячейку:  $(1-1) \rightarrow (0-2)$  ситуация иная. Энергия системы при таком переходе увеличивается на величину  $u$ . Действительно, начальная энергия электронов  $-2u$ , конечная  $-2u + u = -u$ . В такой ситуации можно говорить о наличии потенциального барьера величиной  $u$ . Таким образом, для электронов, имеющих кинетическую энергию, меньшую  $u$ , такой переход оказывается невозможным. Для перехода  $(1-2) \rightarrow (0-3)$  величина барьера равна  $2u$ .

37. Рассмотрим возможную траекторию электрона, находящегося в некоторой центральной ячейке. Пусть это будет электрон из КС-интервала, т. е. его кинетическая энергия на границе ячейки меньше  $u$  ( $u \sim e^2/r_0$ ). Соединим центральную ячейку с окружающими ее ячейками системой связей, соединяющих их центры. Связь между ячейками является прово-

дащей, если электрон может перейти из ячейки в ячейку вдоль этой связи. Как установлено, электрон из КС-интервала может покинуть центральную ячейку только в результате перехода  $(1-0) \rightarrow (0-1)$ . Таким образом, из всех связей, которыми можно соединить центральную и ближайшие к ней ячейки, часть связей — проводящая, а оставшаяся — нет. Количество проводящих связей определяется числом пустых ячеек среди ближайших к данной и равно  $p_0 v$ , где  $v$  — число ближайших ячеек (в простой кубической решетке  $v=6$ ). Фактически, мы пришли к известной «задаче связей» теории протекания [8], а следовательно, и к существованию в рассматриваемом случае критического значения величины  $p_0^{кр}$ , при достижении которого происходит локализация электрона в ЭЯ. Задача об определении  $p_0^{кр}$  сложна и требует отдельного рассмотрения. В теории протекания для простой кубической решетки численными методами получены для  $p_0^{кр}$  значения 0,25–0,31. На рис. 3 стрелкой указано  $\bar{p}_0^{кр} \sim 0,28$  и соответствующее ему значение  $\gamma_0^{кр} \sim 0,7$ , определяемое из уравнения  $p_0(\bar{\gamma}_0^{кр}) = 0,28$ . При этом диапазон изменения  $\gamma_0^{кр} \sim 0,4-1$ .

На основе полученных результатов приходим к следующему описанию траектории электрона, находящегося в КС-состоянии: при  $\gamma < \gamma^{кр}$  электрон с большой вероятностью покинет центральную ячейку, и его траектория является инфинитной. Он, например, может давать вклад в электропроводность и в этом случае справедливо рассмотрение [2]. При  $\gamma > \gamma^{кр}$  происходит локализация электрона в элементарной ячейке и он не дает вклада в электропроводность. Отметим, что к выводу о локализации электронов в окрестности ближайшего иона приходят авторы [9], интерпретируя результаты по термодинамическим и корреляционным функциям неидеальных кулоновских систем, полученные методом Монте-Карло.

Зг. Сравнительно простая картина распределения электронов по ЭЯ при  $\gamma > \gamma^{кр}$  позволяет предложить эффективный потенциал взаимодействия электрона с ионом, учитывающий влияние окружающих частиц. Установлено, что это влияние приводит к запираанию (локализации) электронов с малыми энергиями связи (для КС —  $e^2/r_0 < E < 0$ ) внутри элементарной ячейки. Возникающий при этом потенциальный барьер обусловлен электрон-электронным отталкиванием при переходе рассматриваемого электрона в соседнюю ячейку. Пренебрегая в первом приближении формой потенциального барьера и располагая его на границе ячейки, можно предложить следующий потенциал:

$$V(r) = \begin{cases} -e^2/r, & r < r_0 \\ 0, & r > r_0. \end{cases} \quad (13)$$

При записи (13) учтено, что величина потенциального барьера  $u \sim e^2/r_0$ . Предложенный потенциал отражает, на взгляд автора, главную особенность КС-состояний — их локализацию в элементарной ячейке при  $\gamma > \bar{\gamma}^{кр}$ .

Зд. Обсудим качественно некоторые особенности спектра КС-состояний в потенциале (13). Уравнение для спектра  $s$ -состояний в таком потенциале получено в [10]. На основе результатов [10] можно вычислить число  $s$ -состояний, реализующихся в интервале КС

$$M \cong \sqrt{\frac{1}{2\pi^2} \frac{r_0}{a_0}}, \quad (14)$$

где  $a_0$  — боровский радиус. Из (14) следует, что с ростом плотности (уменьшением  $r_0$ ) число состояний в рассматриваемом интервале энергий уменьшается и при  $r_0 = 2\pi^2 a_0$  обращается в единицу. На рис. 4 в координатах  $n_e$  (плотность) и  $T$  (температура) приведены зависимости  $\gamma = \gamma^{кр} \cong 0,7$  и  $M = 1$  и зависимость, следующая из условия  $n_e \lambda_e^3 = 1$  ( $\lambda_e$  — дебройлевская длина волны электрона). На графике отмечены условия  $(n_e, T)$ , соответствующие эксперименту [5] по измерению коэффициента непрерывного поглощения плотной плазмы аргона.

В [4] выдвинуто предположение о «нереализации» верхних уровней. Полученные в данной работе результаты допускают следующую интерпретацию этого эффекта: в условиях существенной кулоновской неидеальности ( $\gamma \geq \gamma^{кр}$ ) происходит локализация слабосвязанных электронных состояний (КС-состояния) в элементарной ячейке, причем число состояний, в которых может находиться локализованный электрон, невелико.

Автор выражает благодарность В. С. Воробьеву, Г. А. Кобзеву, А. К. Сарычеву за полезные обсуждения.

Институт высоких температур  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
18.IV.1980

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Воробьев В. С., Хомкин А. Л. Столкновительные комплексы в плазме и их влияние на электропроводность.— Физика плазмы, 1977, т. 3, с. 885.
2. Кудрин Л. П. Статистическая физика плазмы. М.: Атомиздат, 1974.
3. Хомкин А. Л. К расчету термодинамических функций, состава и электропроводности плазмы инертных газов.— ТВТ, 1978, т. 16, с. 37.
4. Кобзев Г. А., Куриленков Ю. К., Норман Г. Э. К теории оптических свойств неидеальной плазмы.— ТВТ, 1977, т. 15, с. 193.
5. Беспалов В. Е., Грязнов В. К., Фортгов В. Е. Излучение ударно-сжатой плазмы аргона высокого давления.— ЖЭТФ, 1979, т. 76, с. 140.
6. Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. К статистической теории неидеальной плазмы.— ТВТ, 1972, т. 10, с. 1160.
7. Хуанг К. Статистическая механика. М.: Мир, 1966.
8. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. М.: Наука, 1979.
9. Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. Термодинамика и корреляционные функции слабонеидеальных недебаевских кулоновских систем.— ТВТ, 1973, т. 11, с. 922.
10. Ростокин В. И. К теории энергетических уровней атомов в плазме.— ЖЭТФ, 1966, т. 50, с. 1586.