

И. Л. Иосилевский, Ю. Г. Красников,

Э. Е. Сон, В.Е.Фортов

**ТЕРМОДИНАМИКА И ТРАНСПОРТ
В НЕИДЕАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕ**

Москва 2002

Издание осуществлено при поддержке федеральной целевой программы «Государственная поддержка и интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 1997 – 2000 годы»

ИОСИЛЕВСКИЙ И.Л., КРАСНИКОВ Ю.Г., СОН Э.Е. ФОРТОВ В.Е.
Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме
— М.: Изд-во МФТИ, 2000.—476 с.—ISBN 5-89155-017-2

Рассматриваются основы физики неидеальной плазмы, экспериментальные методы измерений в динамических экспериментах – давления, скорости, сжимаемости, электропроводности, излучения, проводится анализ экспериментальных работ, выполненных в последние годы. Изложены общие термодинамические свойства неидеальной плазмы, проведен анализ моделей и сравнение расчетных результатов с экспериментами для неидеальной плазмы щелочных металлов, инертных газов и паров металлов в сильных ударных волнах. Теоретически исследованы проблемы термодинамической устойчивости и фазовых переходов в неидеальной плазме. Проведены оценки критических параметров металлов. Последовательно изложена классическая и квантовая статистическая теория термодинамики неидеальной плазмы. Используется аппарат функций Грина в статистической механике. Анализируются различные приближения в физической и химической моделях плазмы. Проводится анализ процессов, определяющих транспортные процессы в низкотемпературной неидеальной плазме. Вследствие важности как нейтральных, так и заряженных частиц в плазме, рассматривается кинетическая теория нейтральных газов и плазмы. Изложены различные кинетические уравнения для газов и плазмы и методы вычислений транспортных коэффициентов. Проведен анализ широкодиапазонных уравнений состояния и транспортных коэффициентов. Рассматривается приближение локального химического равновесия в плотной низкотемпературной плазме, приводятся выражения для коэффициентов переноса в условиях ЛТР. Приводятся систематические данные по сечениям рассеяния и потенциалам взаимодействия плазмы щелочных металлов и инертных газов. Проводится сравнение экспериментальных и расчетных значений транспортных коэффициентов в низкотемпературной неидеальной плазме.

Это первая столь обширная монография по физике неидеальной плазмы. Она рассчитана на аспирантов и студентов-физиков, математиков и механиков, занимающихся вопросами нелинейной физики, инерционного синтеза, гидродинамической неустойчивости и турбулентности.

Табл.28. Ил. 338. Библиогр. 713 назв.

Научное издание

Термодинамика и транспорт в неидеальной плазме

Текст книги дается в авторской редакции

Верстка *А. П. Носова* Художник *М. В. Ивановский*

ЛР № 064290 от 14.11.95. Подписано в печать 15.09.99. Формат 60x90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 30,0. Уч.-изд. л. 32,0. Тираж 1000 экз. Заказ 985

Издательство МФТИ. 141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9 Тел./факс 408-76-81. <http://www.fizmatlit.ru>.

Отпечатано с готовых позитивов в 000 «Политех-4». 129110 Москва, ул. Б. Переяславская, 44.

Оглавление

I	Неидеальная плазма в природе и лаборатории	8
1	Основные представления о неидеальной плазме	9
1.1	Общая характеристика и параметры неидеальной плазмы	9
1.1.1	Границы неидеальности газовой плазмы	11
1.1.2	Кулоновское взаимодействие	11
1.1.3	Квантовая плазма	13
1.1.4	Взаимодействие "заряд-нейтрал"	14
1.1.5	Взаимодействие "нейтрал-нейтрал"	15
1.1.6	Химическое равновесие в плазме	16
1.2	Неидеальная плазма различных веществ	16
1.2.1	Плазма металлов	16
1.2.2	Плазма инертных газов	18
1.2.3	Плазма с ионами высокой кратности	19
1.3	Научно-технические приложения неидеальной плазмы	20
2	Экспериментальные методы в физике высоких давлений	26
2.1	Методы регистрации профилей давления	26
2.1.1	Манганиновые пьезорезисторы	26
2.1.2	Кварцевые датчики давления	31
2.1.3	Диэлектрические и сегнетоэлектрические датчики давления	32
2.2	Методы регистрации профилей скорости	33
2.2.1	Дискретные методы измерения скоростей	34
2.2.2	Емкостные датчики скорости	34
2.2.3	Магнитоэлектрический метод	35
2.2.4	Лазерные доплеровские измерители скорости	36
2.2.5	Доплеровское измерение массовой скорости	40
2.3	Методы измерения ударной сжимаемости	42
2.3.1	Метод гамма-репера	43
3	Методы генерации неидеальной плазмы	48
3.1	Взрывные генераторы динамических давлений	48
3.2	Баллистические установки	52
3.3	Перспективные источники высоких динамических давлений	54
3.4	Неидеальная плазма в ударных волнах	55
3.4.1	Определение уравнения состояния из экспериментов	58
3.4.2	Динамическое сжатие плазмы цезия	63

3.5	Сжатие инертных газов мощными ударными волнами	65
3.6	Изоэнтропическое расширение ударно-сжатых металлов	73
3.7	Уравнения состояния при сверхвысоких давлениях	82
3.8	Перспективные генераторы мощных ударных волн	85
3.9	Относительные измерения ударных адиабат	88
II Термодинамические свойства плазмы		104
4	Общее термодинамическое описание плазмы	105
4.1	Структура термодинамического описания	105
4.1.1	Суммарные термодинамические функции	106
4.1.2	Расширенное описание	106
4.1.3	Уравнения состояния	107
4.1.4	Дифференциальные термодинамические характеристики	108
4.1.5	Безразмерные термодинамические комплексы (БТК)	108
4.1.6	Корреляционные функции (КФ)	110
4.1.7	Структурные характеристики	113
4.1.8	"Гиперприближения" для корреляционных функций	114
4.2	Область неидеальности в фазовой диаграмме	115
4.2.1	"Газовый" предел	117
4.2.2	Предел сверхплотной плазмы	118
4.3	Термодинамика слабонеидеальной плазмы	121
4.3.1	Свойства термического уравнения состояния газовой НТП	123
4.3.2	Свойства калорического уравнения состояния газовой НТП	125
4.4	Предельная структура термодинамических зависимостей	128
4.4.1	Химический потенциал плазмы как управляющий параметр	128
4.4.2	Термохимические константы в ХМП-пределе	129
4.4.3	Суммарные термодинамические функции	129
4.4.4	Дифференциальные термодинамические характеристики	131
4.4.5	Обобщенная "холодная кривая" вещества	132
4.4.6	Полосы ионизации как "размытый" фазовый переход	132
4.4.7	Нулевое приближение химической модели плазмы	133
4.5	Термодинамика плотной плазмы	135
4.5.1	Термодинамика НТП в переходной области	137
4.5.2	Термодинамические аномалии НТП в переходной области	139
4.6	Термодинамическое описание и сплошная среда	140
4.6.1	Термодинамическое описание в задачах термоэлектростатики	140
4.6.2	Термодинамическое описание и задачи гидродинамики	141
5	Термодинамические свойства ударно сжатой плазмы	146
5.1	Химическая модель плазмы в области малых плотностей	149
5.2	Химическая модель в области больших сжатий	151
5.2.1	Эффективное взаимодействие зарядов	153
5.2.2	Термодинамические модели ударно-сжатого ксенона и цезия	157
5.2.3	Модель ограниченного атома для аргона и цезия	160
5.2.4	Ударные адиабаты пористых металлов (Ni, Fe, Cu)	165

5.2.5	Термодинамика экстремально сжатых металлов (<i>Al, Ni, Fe, Cu</i>)	172
5.2.6	Термодинамика экстремально сжатого водорода и дейтерия . . .	175
5.3	ХМП как широкодиапазонное уравнение состояния	179
6	Термодинамическая устойчивость и фазовые переходы	183
6.1	Общие условия термодинамической устойчивости	183
6.1.1	Условия термодинамической устойчивости	184
6.1.2	Дифференциальная форма условий ТУ	184
6.1.3	Интегральная форма условий ТУ	185
6.1.4	Ограничения на термодинамические зависимости	185
6.2	Потенциал как термодинамическая переменная	189
6.2.1	Общие ограничения	189
6.2.2	Линейное "включение" взаимодействия	190
6.2.3	Вариация масштаба	192
6.2.4	Ограничения для классических систем	193
6.2.5	Кулоновские системы	194
6.2.6	Экстремальные свойства энтропии	195
6.2.7	Приложения вариационного принципа	197
6.2.8	Безассоциативные модели плазмы (БМП)	197
6.3	Условия ТУ в кулоновских системах	198
6.3.1	Особенности термодинамического равновесия в плазме	199
6.3.2	Дисбаланс заряда	200
6.3.3	Приповерхностный двойной электрический слой	200
6.3.4	Химический потенциал в кулоновской системе	201
6.3.5	Химический и электрохимический потенциалы	201
6.3.6	Условия локальной электронейтральности	202
6.3.7	Фазовое расслоение	204
6.3.8	Профиль свободных зарядов в неоднородном случае	205
6.3.9	Химический и электрохимический потенциалы в условиях ТУ плазмы	206
6.3.10	Термодинамическая устойчивость в моделях плазмы	209
6.3.11	Однопараметрические приближения $\Delta F/NkT = f(\Gamma)$	209
6.3.12	Компактные приближения в разложении по активности	210
6.3.13	Плазменное разложение по степеням активности	211
6.4	Фазовые переходы в плазме	212
6.4.1	Особенности "обычных" переходов газ-жидкость в плазме	215
6.4.2	Гипотетический "плазменный" фазовый переход	218
6.4.3	Электростатика фазовой границы в кулоновских системах	226
6.4.4	Фазовые переходы в кулоновских системах	237
6.4.5	Оценки параметров критической точки металлов	244
6.4.6	Фазовое равновесие в неидеальной химически активной плазме	248
III	Основы теории термодинамики плазмы	269
7	Термодинамика классических систем	270
7.1	Классическое статистическое описание газа и плазмы	270

7.2	Уравнение Лиувилля	274
7.3	Цепочка уравнений для s -частичных функций распределения	275
7.4	Термодинамика плотных нейтральных газов	278
7.5	Функции распределения неидеальных газов	284
8	Термодинамика квантовых систем	290
8.1	Статистическое описание квантовых систем заряженных частиц	290
8.2	Основные уравнения квантовой статистики	294
8.3	Метод вторичного квантования в статистической физике	297
8.4	Термодинамическая диаграммная техника	300
8.5	Фурье-преобразование функций Грина	306
9	Квантовая статистика и термодинамика плазмы	311
9.1	Эффективный потенциал. Кольцевые диаграммы	311
9.2	Связанные состояния. Лестничные диаграммы	319
9.3	Непрерывный спектр. Квазиклассическое приближение	328
9.4	Дискретный спектр	336
9.5	Термодинамические функции плазмы	339
9.6	Основы химической модели плазмы	344
9.7	Приложение. Вычисление некоторых интегралов	350
IV	Процессы переноса в неидеальной плазме	357
10	Транспортные процессы в низкотемпературной плазме	358
10.1	Качественное описание процессов переноса	358
10.2	Транспортные свойства нейтральных газов	361
10.2.1	Кинетическое уравнение Больцмана	361
10.2.2	Уравнение Лиувилля и цепочка Боголюбова	362
10.2.3	Кинетические уравнения системы частиц с короткодействующим потенциалом	365
10.2.4	Коэффициенты переноса нейтральных газов	368
10.3	Кинетические уравнения для системы заряженных частиц	377
10.3.1	Интеграл столкновений Ландау	377
10.3.2	Интеграл столкновений Ленарда-Балеску	379
10.3.3	Иерархия кинетических уравнений	385
10.3.4	Коэффициенты переноса ионизованных газов	386
11	Метод функций Грина в кинетической теории плазмы	392
11.1	Функции Грина в системе многих тел	392
11.2	Метод ВКФ в кинетической теории плазмы	403
11.3	Электропроводность плазмы	409
11.4	Вычисление коэффициентов переноса методом функций Грина	417
12	Электронные коэффициенты переноса в плазме	419
12.1	Электронные коэффициенты переноса в химической модели	419
12.2	Широкодиапазонная модель электронного переноса	426

13	Транспортные свойства многокомпонентной плазмы	438
13.1	Явления переноса в реагирующих газовых смесях	438
13.2	Эффективные коэффициенты переноса плазмы	443
13.3	Методика расчетов и результаты	449

Введение

Предлагаемая книга является учебным пособием по физике низкотемпературной плазмы высокого давления сжатой настолько сильно, что ее поведение определяется эффектами межчастичного взаимодействия - плазменной "неидеальностью". Последний термин отличает эту плазму от хорошо изученного случая плазмы низкой плотности или высокой температуры, где межчастичным взаимодействием можно пренебречь по сравнению с кинетической энергией движения частиц. Это оправдывает в этом случае модели идеального химически реагирующего газа, созданной в первой половине прошлого века, и является к настоящему времени вполне классическим и завершенным разделом физики. Неидеальная плазма, напротив, является сейчас бурно развивающимся научным направлением, привлекающим внимание специалистов самых разных специальностей, не только потому что подавляющая часть вещества в нашей Вселенной находится именно в сильносжатом плазменном состоянии, но и потому что состояние плазмы с экзотически высокими температурами и давлениями (речь идет о миллионах и миллиардах атмосфер), люди научились создавать только недавно, используя для этого мощные взрывы, электрические разряды, лазерное, корпускулярное, рентгеновское излучение и иные способы высокой концентрации энергии в веществе. Эти экспериментальные методы позволили быстро продвинуться вверх по шкале давлений на многие порядки величин и войти в новые недоступные ранее области фазовой диаграммы вещества, достигнув удельных концентраций энергии, сравнимых с ядерными, и сделав объектом лабораторных исследований, экзотические состояния вещества, существовавшие в первые минуты после "Большого взрыва". Прагматический интерес к неидеальной плазме связан с ее использованием в ряде перспективных энергетических проектов и технических устройств. Термоядерные реакторы с инерционным удержанием горячей плазмы, мощные взрывомагнитные и магнитокумулятивные генераторы, ядерные энергоустановки и ракетные двигатели, плазмохимические реакторы, лазеры оптического и рентгеновского диапазонов, мощные ударные волн, возбуждаемые химическими ВВ, лазерным и рентгеновским излучением, физика и техника мощных химических и ядерных взрывов, и высокоскоростной удар, электровзрывные явления, управление мегаамперными токами при генерации интенсивного СВЧ и рентгеновского излучений, сильноточные плазмотроны, анализ структуры и эволюция звезд и планет - гигантов, а также межзвездной пыли - вот неполный перечень проблем, где необходимы надежные сведения о термодинамических, оптических и транспортных свойствах сильносжатой плазмы сложного элементного состава. Дополнительную остроту обсуждаемой проблеме придают обнаруженные недавно "плазменные" фазовые переходы с образованием упорядоченных структур в сильнозаряженной пылевой плазме, двумерной плазме электронов на поверхности жидкого гелия, ионной ультрахолодной плазме в электростатических ловушках и ускорителях ионов, в электроннодырочной плазме полупроводников. Полученный к настоящему времени материал по проблеме неидеальной плазмы весьма значителен и содержится в громадном (многие тысячи) количестве статей, тезисов монографий, отчетов, большинство из которых малодоступно для российского читателя особенно в наше время острого дефицита на научную литературу. Имеющиеся же специализированные обзоры, монографии и появившаяся недавно энциклопедия [1] рассчитаны на достаточно подготовленного читателя, профессионально работающего в этой области. Цель же нашей книги -

написать учебник, рассчитанный на студентов, аспирантов и молодых научных сотрудников входящих в эту увлекательную и динамичную область науки. По существу она написана как введение в физику неидеальной плазмы. Несмотря на значительное количество ссылок материал дан в оригинальном изложении.

Структура учебного пособия следующая. В первой части излагаются основные сведения о неидеальной плазме, описываются экспериментальные методы и приводятся примеры изучаемого объекта в природе и лабораториях. Во второй части дается описание термодинамических свойств низкотемпературной плазмы как системы с сильным коллективным взаимодействием частиц. Приводятся примеры расчетов параметров плазмы различного химического состава применительно к практике, обсуждаются проблемы термодинамической устойчивости плазменных систем и проблемы фазовых границ. Третья часть посвящена последовательному описанию термодинамики плазмы исходя из первых принципов. Описывается детально модели классической и квантовой плазмы как системы многих частиц с кулоновским потенциалом взаимодействия. Описание основано на температурной диаграммной технике и доводится до конкретных результатов. Последняя часть содержит как теоретическое описание процессов переноса, так и модельные приближения к расчету транспортных средств низкотемпературной неидеальной плазмы. Отдельные элементы данной книги составляют предмет лекций, которые авторы читают студентам, старшекурсникам и аспирантам МФТИ, и ряда зарубежных университетов. Часть материала составляет содержание ряда пленарных и обзорных докладов на конференциях по физике плазмы. Для понимания изложенного в книге материала достаточно знаний в объеме 3 курсов университетского образования. Подготовка материалов и издание учебного пособия осуществлено при частичной поддержке программ "Интеграция академической науки и высшего образования", CRDF и Минобрнауки России "Фундаментальные исследования и высшее образование" (проекта В-Р/252), межотраслевой программы Минатом - Минобрнауки и программы "Университеты России".

Физика неидеальной плазмы быстро развивающаяся область современной физики и поэтому представленный здесь материал будет постоянно уточняться и дополняться. Мы благодарны нашим коллегам за пожелания и критические замечания. Мы искренне благодарны также нашим коллегам, с которыми выполнены многочисленные расчеты, эксперименты и стимулирующие обсуждения вопросов, составляющих предмет данного учебника. Особую благодарность мы хотели бы выразить коллективу студентов и аспирантов МФТИ, а также О.С.Галькевич за многолетний кропотливый труд по подготовке учебного пособия, выполненного методами современных издательских ТeXнологий.

Литература

[1] Энциклопедия по низкотемпературной плазме, в 4 т. под ред. В.Е.Фортова, М.: Наука, 2000 г.

Академик В.Е.Фортов

Часть I

Неидеальная плазма в природе и лаборатории

Глава 1

Основные представления о неидеальной плазме

1.1 Общая характеристика и параметры неидеальной плазмы

Плазму иногда называют четвертым состоянием вещества. Из трех состояний вещества - газа, жидкости и твердого тела, плазма ближе всего к газообразному состоянию. Наиболее естественным способом получения плазмы является нагрев газа любого вещества, которое при нормальных условиях находится в газообразном состоянии. При нагреве, например, воздуха, при нормальных условиях, происходит увеличение температуры, т.е. рост кинетической энергии молекул азота и кислорода. Когда часть молекул приобретает кинетическую энергию, достаточную при соударении двух молекул для разрыва межмолекулярных связей, происходит распад молекул на атомы - возникает диссоциация и переход к атомарному состоянию газа. Температура газа в этой области практически не возрастает, т.к. подводимое к газу тепло затрачивается на разрыв межмолекулярных связей. После завершения реакций диссоциации при дальнейшем нагреве газа отдельные атомы приобретают энергию, достаточную для ионизации, т.е. распаду атома на ион и электрон. При дальнейшем подводе тепла все большее количество атомов ионизуется и возникает частично - ионизованная плазма. Далее все атомы ионизируются и возникает полностью ионизованная плазма. При еще большем нагреве ионы при столкновениях с электронами и взаимных столкновениях начинают ионизоваться еще раз и возникают двукратно заряженные ионы и так далее до тех пор, пока не останутся полностью ионизованные ионы без электронных оболочек. Принципиальным отличием плазмы от газа является то, что заряженные частицы, образующие плазму, взаимодействуют по кулоновскому потенциалу с большим радиусом взаимодействия в отличие от короткодействующего потенциала взаимодействия между нейтральными частицами. При дальнедействующем потенциале взаимодействие частиц становится коллективным, в отличие от парного, характерного для нейтральных частиц. Другой особенностью плазмы является ее взаимодействие с внешними электромагнитными полями и генерация собственных электромагнитных полей. Еще одной важной отличительной особенностью плазмы является наличие в ней электронов - заряженных частиц, имеющих заряд равный заряду ионов, но массу в тысячи раз меньше массы атомов и молекул. Электроны, являясь малыми подвижными частицами, определяют перенос энергии (теплопроводность),

заряда (электропроводность) и энергообмен излучением, т.к. излучение возникает при торможении заряженных частиц и процессах фоторекомбинации, происходящих с участием электронов.

Плазма условно делится на высокотемпературную и низкотемпературную с граничной температурой, соответствующей потенциалу ионизации атома водорода (13.6-эВ). При малых плотностях низкотемпературная частично ионизованная плазма может рассматриваться как смесь идеальных газов молекул, атомов, ионов и электронов. Частицы движутся с тепловыми скоростями, в основном по прямолинейным траекториям, лишь изредка сталкиваясь друг с другом. При повышении плотности средние расстояния между частицами уменьшаются и все большее время частицы начинают проводить, взаимодействуя друг с другом, т.е. находиться в полях окружающих их частиц. В этих условиях возрастает средняя энергия взаимодействия между частицами. Когда средняя энергия межчастичного взаимодействия оказывается сопоставимой с характерной кинетической энергией теплового движения, плазма становится неидеальной. Свойства такой плазмы перестают описываться соотношениями теории идеальных газов и плазмы и становятся весьма необычными.

Теоретическое описание низкотемпературной плазмы (НТП) может быть основано на двух моделях - "физической модели плазмы" (ФМП) и "химической модели плазмы" (ХМП). В ФМП основными структурными элементами являются электроны и ионы (возможно разной кратности), а сложные частицы - атомы, молекулы, более сложные комплексы предполагаются состоящими из элементарных и их свойства должны определяться в результате решения задачи. Однако, такой подход, как и в других областях макроскопической физики является сложным, несмотря на то, что, в принципе даже сложные биологические объекты состоят из атомов и электронов, их описание "из первых принципов", даже с учетом современных вычислительных возможностей, пока не приводит к успеху. Во второй - ХМП плазма предполагается состоящей из устойчивых комплексов - молекул, атомов, ионов и электронов, взаимодействующих между собой посредством эффективных потенциалов - короткодействующих для взаимодействия нейтральных частиц и дальнедействующих - для заряженных. При таком описании необходимо вводить в рассмотрение границы между частицами и решать проблемы возникновения расходимостей, отсутствующих в физических моделях. Кроме свойств отдельных сортов частиц, присущих каждому сорту, возникает проблема описания взаимодействия частиц с окружающей средой (например, энергетический спектр атома в вакууме отличается от спектра атома в среде).

Для последовательного теоретического анализа доступны лишь состояния с экстремально высокими давлениями и температурами, расположенными на периферии фазовой диаграммы вещества. Область существования электронной неидеальной плазмы оказывается расположенной на рис. 1.1 внутри треугольника, ограниченного кривыми $\varepsilon_F = e^2 n_e^{1/3}$ и $\Gamma = 1$, верхняя часть этой области относится к вырожденной, нижняя - к бoльцмановской плазме, а максимально возможные значения параметра неидеальности являются конечными и не превосходят нескольких единиц. При больших плотностях плазма остается сильнонеидеальной благодаря межиионному взаимодействию и остается неидеальной вплоть до вырождения ионов.

1.1.1 Границы неидеальности газовой плазмы

В рамках ХМП НТП рассматривается как смесь широкого спектра комплексных частиц, взаимодействующих при помощи эффективных потенциалов. Основной эффект, приводящий к значительно более скромным размерам той зоны параметров, что традиционно называется неидеальной плазмой, состоит в том, что эти эффективные взаимодействия значительно более "слабые", нежели исходное кулоновское взаимодействие ядер и электронов. В результате граница неопределенности термодинамического описания НТП, сформулированная на языке параметров неидеальности этих эффективных взаимодействий, заметно сдвинута в глубину обширной области газовой НТП, первоначально включенной в область неидеальной плазмы. Наличие в ХМП нескольких типов эффективных взаимодействий приводит к набору соответствующих параметров неидеальности.

1.1.2 Кулоновское взаимодействие

В качестве параметра неидеальности в ХМП в общем случае фигурирует отношение средней потенциальной энергии кулоновского взаимодействия свободных зарядов к средней кинетической энергии их поступательного движения. Для простейшего случая невырожденной однократно ионизованной плазмы используют энергию взаимодействия двух зарядов, на среднем расстоянии $\sim n_{\text{зар}}^{-1/3}$, отнесенную к температуре kT :

$$\gamma \equiv \frac{e^2 (4\pi n_{\text{зар}}/3)^{1/3}}{kT} \sim \frac{n_{\text{зар}}^{1/3}}{T}. \quad (1.1)$$

При качественном описании заряженных частиц, взаимодействующих посредством кулоновского потенциала, воздействие окружающей среды других заряженных частиц приводит к тому, что индивидуальные взаимодействия частиц складываются в коллективные, в плазме возникают "квазичастицы", т.е. частицы одного знака, окруженные "шубой" из частиц противоположного знака, экранирующие заряженную частицу от других квазичастиц, стенок и внешних полей. В низкотемпературной плазме размер области экранирования, называемый радиусом Дебая, является определяющим параметром, его выражение следует из решения самосогласованной задачи распределения частиц в потенциальном поле и самого потенциала, определяющегося распределением частиц [18]:

$$r_D = \left(\frac{4\pi e^2 \sum_l Z_l^2 N_l}{kT} \right)^{-1/2}. \quad (1.2)$$

Дебаевский радиус является расстоянием, на котором происходит экранирование заряда, поэтому характерной энергией кулоновского взаимодействия частиц является Ze^2/r_D . Если эта энергия мала по сравнению с кинетической энергией частиц, характеризующейся температурой, то плазма является идеальной. Параметром, определяющим свойства плазмы является

$$\Gamma = \frac{Ze^2}{r_D kT}, \quad (1.3)$$

который называют плазменным или дебаевским параметром неидеальности.

Легко видеть, что критерий (1.3) можно выразить через N_D - число заряженных частиц в дебаевской сфере $N_D \gg 1$. Таким образом, критерий идеальности плазмы,

т. е. малости энергии кулоновского взаимодействия по сравнению с кинетической, совпадает с условием применимости дебаевского приближения - число заряженных частиц в дебаевской сфере должно быть велико. При $kT = 1$ эВ идеальной плазме, в которой $\Gamma \leq 0,1$, соответствует концентрация электронов много меньшая, чем 10^{18} 1/см³.

Связь параметра неидеальности Γ с числом частиц N_D в дебаевской сфере r_D имеет вид:

$$\Gamma \equiv \frac{e^2}{r_D kT} \sim \frac{n_{\text{зар}}^{1/2}}{T^{3/2}}, \quad N_D \equiv \left(\frac{4\pi n_{\text{зар}} r_D^3}{3} \right), \quad (1.4)$$

$$r_D^{-2} \equiv k_D^2 \equiv \left(4\pi \sum n_i Z_i^2 \right) \left(\frac{e^2}{kT} \right). \quad (1.5)$$

Все три параметра Γ , γ и N_D асимптотически равносильны и в случае однократной ионизации просто выражаются друг через друга:

$$\Gamma \equiv \left(3\gamma^3 \right)^{1/2} \equiv \left(3N_D \right)^{-1}. \quad (1.6)$$

Параметр Γ более удобен в пределе слабонеидеальной газовой НТП. В этом случае он с точностью до множителя порядка единицы совпадает с величиной (безразмерных) поправок на неидеальность в простейшем, дебаевском приближении. Малость параметра Γ (как и параметров γ и $(1/N_D)$) является условием применимости этого приближения. В свою очередь использование параметра γ более естественно в пределе сильной неидеальности ($\gamma \gg 1$) ("квазикристаллический предел"), где этот параметр с точностью до множителя порядка единицы совпадает с величиной (безразмерной) характеризующей главный эффект кулоновского взаимодействия. Так например, в модели однокомпонентной плазмы (ОКП) безразмерная поправка к внутренней энергии $\Delta U/NkT$, в пределе $\gamma \gg 1$, близка к ограничивающей ее снизу величине - $const \cdot \gamma$ ($const = 0.9$) [207].

В общем случае многозарядной плазмы возможна разная интенсивность взаимодействия, и соответственно, разная степень корреляции среди зарядов разной кратности. В этом случае используются несколько параметров (кулоновской) неидеальности. Для типичного случая комбинации невырожденных электронов и ионов заряда Z , удовлетворяющих условию $Z \gg 1$ (или других примеров резко несимметричной плазмы, например НТП, где наряду с электронами и ионами содержатся заряженные кластеры, пылинки, капли и т.д), наряду с параметром Γ используются отдельные параметры ион-ионных, ион-электронных и электрон-электронных корреляций (неидеальности):

$$\gamma_{ZZ} \equiv \frac{(Ze)^2 (4\pi n_Z/3)^{1/3}}{kT} \sim \frac{Z^2 n_Z^{1/3}}{T}, \quad \gamma_{Ze} \equiv \frac{Ze^2 (4\pi n_Z/3)^{1/3}}{kT} \sim \frac{Z n_Z^{1/3}}{T}, \quad (1.7)$$

$$\gamma_{ee} \equiv \frac{e^2 (4\pi n_e/3)^{1/3}}{kT} \sim \frac{n_e^{1/3}}{T}.$$

В случае вырождения электронного компонента два последних параметра модифицируются с учетом реальной зависимости кинетической энергии электронов от плотности. Для случая сильно сжатой плазмы, или случая двухтемпературной плазмы, когда $T_e \gg T_i$, достаточно типичной является ситуация когда электронный

компонент слабо неидеален из-за высокой температуры T_e или в силу вырождения ($n\lambda_e^3 \gg 1$), так что выполняется условие $\gamma_{ee} \ll \gamma_{ze} \ll 1$ (например, недра астрофизических объектов ($r_S \ll 1$) и др., в то же время ионный параметр велик ($\gamma_{ZZ} \gg 1$), и ионы сильно коррелированы (неидеальны) "на фоне" квазиоднородного почти идеального газа электронов. Более сложной является ситуация, когда выполняется условие $\gamma_{ee} \ll \gamma_{ze} \sim 1, \gamma_{ZZ} \gg 1$. Во многих случаях в этой ситуации достаточно эффективным является использование одного из вариантов ячеечного подхода.

1.1.3 Квантовая плазма

При описании явлений на атомных масштабах может проявиться квантовый характер движения частиц. При квантовом описании частица описывается волной с длиной волны Де-Бройля $\lambda_a = (2\pi\hbar^2/m_a kT)^{1/2}$. Отсюда следует, что наибольшую длину волны имеют электроны, поэтому квантовый характер в первую очередь проявляется при движении электронов. Квантовые явления проявляются в двух случаях - при рассеянии заряженных частиц и при учете вырождения. Для кулоновских столкновений сечение рассеяния пропорционально квадрату амплитуды рассеяния $f = Ze^2/kT$, поэтому параметром определяющим квантовый характер рассеяния является $\eta = \lambda_e/f$. Вырождение частиц определяется отношением объема де-бройлевской сферы к объему, приходящемуся на частицу. Вследствие того, что для электронов длина волны Де-Бройля наибольшая, при повышении плотности первыми начинают вырождаться электроны, для которых параметр вырождения $A_e = n_e \lambda_e^3$.

При понижении температуры в качестве характерной энергии вместо kT нужно использовать энергию Ферми

$$\varepsilon_F = \left(3\pi^2 n_e\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m}, \quad (1.8)$$

которая растет с увеличением плотности плазмы. Критерий неидеальности приобретает вид

$$\gamma_{кв} = \frac{e^2 n_e^{1/3}}{\varepsilon_F} \geq 1, \quad (1.9)$$

поэтому вырожденная электронная плазма становится более идеальной по мере сжатия, параметр $\gamma_{кв}$, уменьшается, поскольку $\varepsilon_F \sim n_e^{2/3}$. Следует подчеркнуть, что при более высоких плотностях только электроны представляют собой квазиоднородный идеальный ферми-газ. Ионная компонента неидеальна. В зависимости от степени ее неидеальности говорят о ионной жидкости, о ячейчной структуре, кристалле и других модельных образах ионной подсистемы. Хорошо известно, что даже в разреженной плазме, когда $\gamma \ll 1$, нельзя

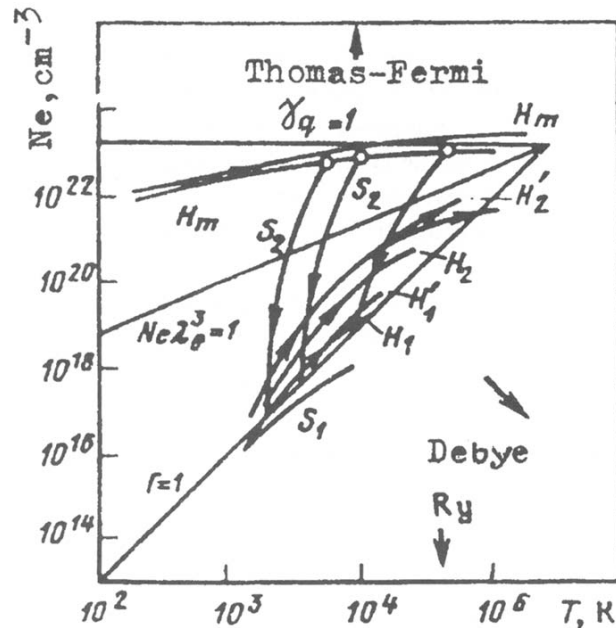


Рис. 1.1: Области существования неидеальной классической и вырожденной низкотемпературной плазмы

непосредственно использовать формулы теории идеальных газов для определения термодинамических и переносных свойств плазмы. Такие величины, как, например, второй вириальный коэффициент или длина свободного пробега, оказываются расходящимися. Это обусловлено спецификой кулоновского потенциала - его медленным убыванием на больших расстояниях и расходимостью на малых.

Области существования неидеальной классической и вырожденной плазмы представлены на рис. 1.1. Они ограничены кривыми $\gamma = 1$, $A_e = n_e \lambda_e^3 = 1$, $\gamma_{\text{кв}} = 1$. На диаграмме указаны также области применимости предельных приближений, описывающих состояние слабонеидеальной плазмы дебаевского и томас-фермиевского приближений.

1.1.4 Взаимодействие "заряд-нейтрал"

В низкотемпературной плазме с заметным присутствием нейтральных частиц (атомов, молекул и др.) в ряде случаев важным оказывается поляризационное взаимодействие ион-атом и электрон-атом [69], являющееся относительно дальнедействующим, $\Phi(r) = -\alpha e^2/2r^4$ (α - поляризуемость). Это актуально, например, в слабо ионизованных низкотемпературных парах щелочных металлов, атомы которых обладают высокой поляризуемостью ($\alpha \sim 100 - 400 a_0^3$). При этом вклад взаимодействия заряд-"нейтрал" в суммарные термодинамические функции (давление, энергию и т.д.) может быть малым, но для свойств, обусловленных именно заряженными частицами (электропроводность, термо-ЭДС и др.), этот вклад может оказаться определяющим [69]. Для поляризационного взаимодействия относительно разреженных (изолированных) зарядов с плотным окружением нейтралов интенсивность этого взаимодействия пропорциональна величине поляризуемости нейтралов, а, а суммарный эффект отрицателен (т.е. в среднем эквивалентен притяжению) и пропорционален числу нейтралов в сфере действия этого потенциала. Для элементарных оценок используется квадратичная по плотности поправка на взаимодействие, соответствующая приближению среднего поля (либо приближению второго вириального коэффициента) [15],[69],[78].

$$\frac{\Delta F_{ai}}{V} \cong -A_{ai} n_a n_i, \quad \frac{\Delta F_{ae}}{V} \cong -A_{ae} n_a n_e, \quad A_{az} \sim \frac{\alpha e^2}{R^*}. \quad (1.10)$$

Для упомянутой выше ситуации слабоионизованной НТП нейтралов с высокой поляризуемостью в качестве безразмерных параметров неидеальности заряд-нейтрал используется отнесенный к температуре сдвиг величины химического потенциала заряженной частицы в результате ее взаимодействия с нейтралами. Так определенные параметры неидеальности, γ_{ai} и γ_{ae} , непосредственно связаны с важным термодинамическим эффектом взаимодействия заряд-нейтрал - эффективным снижением потенциала ионизации ΔI :

$$\gamma_{ai} = \frac{A_{ai} n_a}{kT} = -\frac{\Delta \mu_i}{kT}, \quad \gamma_{ae} = \frac{A_{ae} n_a}{kT} = -\frac{\Delta \mu_e}{kT},$$

$$\Delta I = \Delta \mu_i + \Delta \mu_e \approx (\gamma_{ai} + \gamma_{ae}) kT \quad (a \leftrightarrow i + e). \quad (1.11)$$

Величины $A_{ai} n_a$ и $A_{ae} n_a$ имеют смысл характерной энергии эффективного поляризационного взаимодействия "свободного" электрона или иона с плотным окружением нейтралов. В отношении точного значения константы A_{az} в каждом конкретном случае существует неопределенность, как существует она в отношении самой

величины эффективной глубины взаимодействия "свободной" пары заряд-нейтрал на близких расстояниях. Эта неопределенность отражает общую неопределенность в концепции эффективного взаимодействия свободных частиц в ХМП. Для простых практических оценок в литературе рекомендуется использовать некоторый характерный радиус "обрезания" поляризационного взаимодействия R^* , близкий к "размеру" нейтрала (атома, молекулы и др.) или величину энергии связи заряда с нейтралом в образуемом ими комплексном ионе, например $Cs + Cs^+ \leftrightarrow Cs_2^+$ или $Cs + e \leftrightarrow Cs^-$ и др. Положение эффективных границ неидеальности по взаимодействию заряд-заряд и заряд-нейтрал иллюстрируются на рис.1.2 на примере НТП цезия и ртути и на рис. 2.1 для плазмы водорода.

1.1.5 Взаимодействие "нейтрал-нейтрал"

Характеристика эффекта взаимодействия нейтральных частиц сопровождается несколькими безразмерными параметрами по числу взаимодействующих пар. Во многих случаях для описания термодинамики НТП актуальными одновременно являются несколько таких взаимодействующих пар. Например, при рассмотрении проблемы "плазменного" фазового перехода в плотном водородном флюиде необходимо одновременно учитывать эффект взаимодействия пар: $H_2 - H_2$, $H_2 - H$, $H - H$, а также дополнительно взаимодействия с участием заряженных частиц H_2^+ , H^- , H^+ , e^- и т.д.

Оценка эффекта взаимодействия нейтральных частиц зависит от характера их взаимодействия. Когда рассматривается чисто отталкивательное взаимодействие, стандартным индикатором его малости с точки зрения термодинамики является малость "радиуса" этого взаимодействия R_0 , в сравнении со средним межчастичным расстоянием $n_0^{-1/3}$, что соответствует малости эффективного "собственного объема" частиц

$$n_0 R_0^3 \ll 1. \quad (1.12)$$

В общем случае взаимодействие "нейтрал-нейтрал" помимо интенсивного короткодействующего отталкивания содержит относительно слабое дальнедействующее притяжение. Оценка малости эффекта этого притяжения более проста в случае бинарно-аддитивного притяжения (инертные газы, простые молекулярные газы при низких температурах (слабо диссоциированные) и т.д., см. часть 2). Естественным параметром малости в этом случае помимо (1.12) является отношение глубины притяжения ε , к температуре. На практике наряду с величиной ε часто используется связанная с ней феноменологическая характеристика межчастичного притяжения - критическая температура T_c фазового перехода газ-жидкость в системе :

$$\frac{kT}{\varepsilon} \approx \frac{T}{T_c} \gg 1. \quad (1.13)$$

Проблема теоретического описания неидеальности существенно усложняется в случае, когда короткодействующее притяжение нейтральных (и заряженных) частиц не является бинарно-аддитивным. Это так, например, в случае плотных молекулярных флюидов в области ионизации давлением, а также в случае частично ионизованной НТП продуктов детонации и сгорания химических топлив в ракетных двигателях и т.д. Проблема неидеальности в такой НТП чрезвычайно сложна и сегодня далека от своего разрешения (см.например, [137], [125], см.подробнее [12]).

1.1.6 Химическое равновесие в плазме

Энергия связанного состояния атома по порядку величины равна потенциалу ионизации частиц. В низкотемпературной плазме по определению температура в энергетических единицах меньше потенциала ионизации, что означает, что заряженным частицам энергетически более устойчиво находиться в связанном состоянии в виде атомов. В результате в низкотемпературная плазма представляет собой многокомпонентную систему. Условие термодинамического равновесия выражается в виде равенства $\sum \nu_i \mu_i = 0$ где ν_i - стехиометрические коэффициенты, μ_i - химические потенциалы частиц. В простейшем случае трехкомпонентной плазмы электронов, ионов и атомов из условия $\mu_i + \mu_e = \mu_a$ следует уравнение Саха

$$\frac{n_e n_i}{n_a} = \frac{2g^+}{g_a} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp(-I/kT), \quad (1.14)$$

где I - энергия ионизации атома, g^+ и g_a - внутренние статистические суммы иона и атома. Величина $\alpha = n_e/(n_a + n_i)$ называется степенью ионизации.

Существенно, что электрон и ион, связанные в атоме, находятся на расстоянии порядка радиуса Бора a_0 , который является малым характерным размером в системе. Поэтому электрон и ион, составляющие атом, экранируют друг друга так, что в первом приближении взаимодействием таких пар с окружающими частицами можно пренебречь. Действительно, обратим внимание на то, что энергия связи атома водорода $H = p + e$ равна 13.6 эВ, в то время как энергия связи иона $H^- = p + 2e$ составляет лишь 0,75 эВ, а возможность стабильности $H^{--} = p + 3e$ не установлена и обсуждается в литературе.

После того как атомы выделены, остаточные квантовые эффекты в классической плазме описываются поправками. Они обусловлены прямыми и обменными взаимодействиями. Будучи пропорциональными λ_e/r_D , они малы, если $\lambda_e/r_D \ll l$.

Тем не менее при высокой плотности или при достаточно низких температурах плазма может стать многокомпонентной. В ней образуются молекулы A_2 , молекулярные ионы A_2^+ и отрицательные ионы A^- . Они являются результатов межатомного взаимодействия и взаимодействия заряженных частиц с нейтральными. Концентрации этих частиц вычисляются с помощью уравнений химического равновесия. Например, для реакции образования отрицательного иона $A^- \leftrightarrow A + e$ имеем уравнение

$$\frac{n^-}{n_e n_a} = \left(\frac{g^-}{2g_a} \right) \left(\frac{\hbar^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \exp(E/kT). \quad (1.15)$$

Здесь n^- - концентрация отрицательных ионов, g^- и g_a - внутренние статистические суммы отрицательного иона и атома, E - энергия сродства электрона к атому.

1.2 Неидеальная плазма различных веществ

1.2.1 Плазма металлов

На рис. 1.2 показано, в какой области температур и плотностей может быть получена в экспериментах неидеальная плазма ртути и цезия. Кривая 5 соответствует степени ионизации $\alpha = 0,5$. Она условно разделяет области двухкомпонентной - полностью

ионизованной системы от области, где ионизация лишь частична. Рост температуры вызывает повышение конфигурационного веса свободных состояний электронов и ионов. В результате происходит термическая ионизация. В соответствии с этим высокотемпературная ветвь кривой 5 построена с помощью уравнения Саха (1.14). Известно, однако, что при сильном межчастичном взаимодействии обычное уравнение Саха не описывает реальное ионизационное равновесие. Один из важнейших эффектов состоит в том, что, становясь сильным, взаимодействие приводит к уменьшению энергии связи атомов, иначе говоря, понижает потенциал ионизации. При очень сильном взаимодействии связанные состояния электрона и иона вообще исчезают. Иногда говорят, что происходит ионизация давлением. Ей соответствует ветвь кривой 5, соответствующая высоким плотностям.

Область, занимаемая электронной неидеальной плазмой, со стороны малых температур ограничена кривыми существования пара и жидкости. Со стороны высоких плотностей область классической неидеальности ограничена вырождением электронов, $n_e \lambda_e^3 = 1$ (фактически $N \lambda_e^3 = 1$, поскольку система уже полностью ионизована). При $\rho \geq \rho_{кр}$ происходит металлизация плазмы. Состояния, лежащие выше кривой 4, можно отнести к жидкометаллическим. Однако следует отметить, что прямые измерения, проведенные в ртути [84], показали, что металлическое состояние здесь достигается лишь на кривой б) (рис. 1.2б). Со стороны малых плотностей, т. е. со

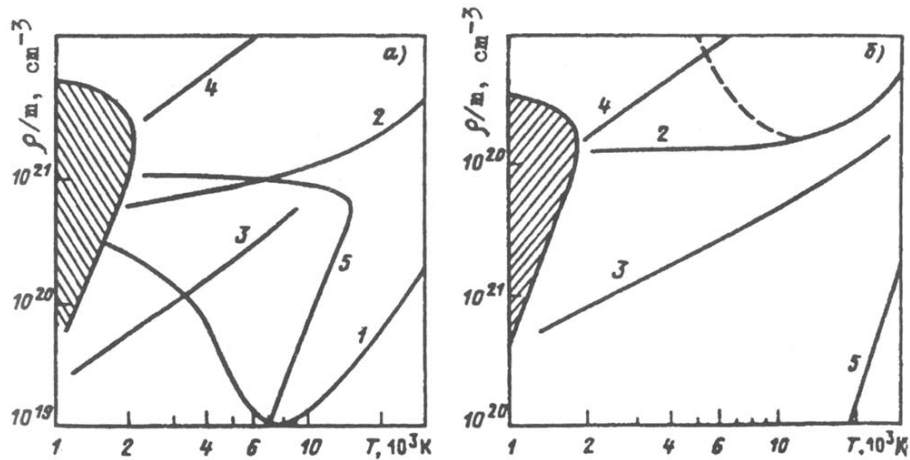


Рис. 1.2: Диаграмма плотность-температура для цезия (а) и ртути (б): 1 - $\Gamma = 1$, 2 - $\gamma = 1$ (пунктир $\gamma = 1$, если n_e определено по уравнению Саха), 3 - $\nu_{ai} = 1$, 4 - вырождение электронов, 5 - $\alpha = 0$, 5. Область сосуществования пара и жидкости заштрихована

стороны идеальной плазмы, область неидеальности ограничена условием равенства энергии взаимодействия и тепловой энергии. Взаимодействие заряд-нейтральная частица становится сильным при $N \geq 10^{20} / \text{см}^3$ в цезии и при $N \geq 10^{21} \text{ см}^{-3}$ в ртути (разница этих значений N обусловлена, главным образом, разницей поляризуемостей). В плазме паров металлов именно это взаимодействие с ростом N выходит при низких температурах на первый план. Оно ответственно за целый ряд качественно новых эффектов, наблюдаемых в парах металлов при температурах, лежащих в окрестности критической.

Взаимодействие заряд-нейтральная частица сдвигает ионизационное равновесие в сторону увеличения n_e . Степень ионизации при больших плотностях не падает с

ростом n_a , согласно (1.14), а возрастает. В результате в окрестности критической точки цезия ионизация оказывается почти полной, а в окрестности критической точки ртути степень ионизации составляет десятки процентов.

С учетом последнего обстоятельства на рис. 1.2 построены кривые $\Gamma = 1$ и $\gamma = 1$, указывающие на идеальность по взаимодействию между зарядами. Для иллюстрации того, насколько ионизационное равновесие не соответствует идеально-плазменному (1.14), на рис. 1.2, б штриховой линией показана также кривая $\gamma = 1$, построенная с помощью уравнения Саха (1.14).

Область, занимаемая недебаевской плазмой, как это следует из рассмотрения рис. 1.2, очень широка. В последнее десятилетие она подверглась очень интенсивному исследованию. Гораздо меньше сведений имеется о сильнонеидеальной плазме, в которой $\gamma \geq 1$, т.е. $\Gamma \geq 5$.

1.2.2 Плазма инертных газов

В отличие от щелочных металлов и ртути для плазмы инертных газов удается реализовать чрезвычайно широкий диапазон параметров и проследить изменение физических свойств такой плазмы от газовых ($n_e \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$) до твердотельных плотностей ($n_e \sim 10^{23} \text{ см}^{-3}$). При этом речь идет об экстремально высоких давлениях - от сотен до миллиона Паскалей при максимальных температурах до 10^5 К . В этих сильнозакритических условиях реализуется плазма с развитой ионизацией.

На рис. 1.3 для ксеноновой плазмы волнистыми линиями указаны области одно- и двукратной ионизации, а также отмечены точки, для которых выполнены термодинамические измерения. Ввиду высоких температур и особенностей электронных оболочек в такой плазме отсутствуют молекулярные и кластерные образования, а из-за малого количества нейтральных частиц преобладающим типом межчастичного взаимодействия является чисто кулоновское. Наибольшие значения параметра неидеальности здесь достигают $\Gamma = 10$. При максимально реализованных в эксперименте плотностях $\rho = 4.5 \div 9.7 \text{ г/см}^3$ (что в несколько раз превосходит твердотельную плотность ксенона $\rho \approx 3 \text{ г/см}^3$) электронная компонента такой плазмы является частично вырожденной, параметр $n_e \lambda_e^3$ достигает значений, близких к 0,5.

При описании плазмы инертных газов при сжатиях до сверхкритических плотностей необходимо учитывать межатомные и межйонные отталкивания. Действительно, при $\rho > \rho_{\text{кр}} = 1.1 \text{ г/см}^3$ характерное межчастичное расстояние в плазме сравнимо с

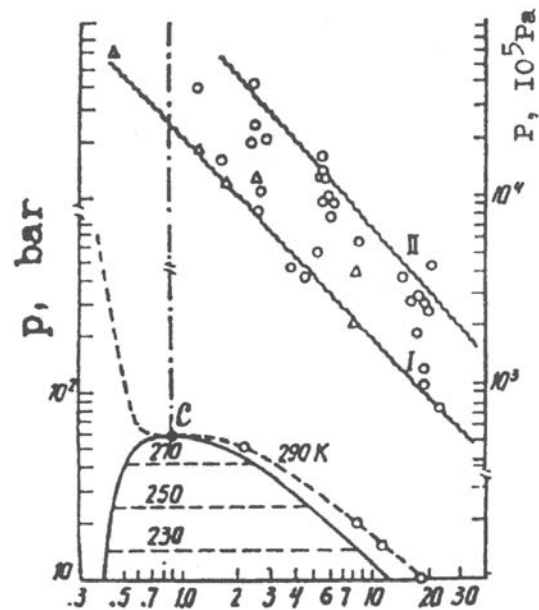


Рис. 1.3: Фазовая диаграмма ксенона: I и II - границы одно- и двукратной ионизации, штриховые кривые - изотермы, К - критическая точка, точки - данные измерений термодинамических параметров

размером атомов и ионов в основном ($a_{Ar} = 3.4 \cdot 10^{-8}$ см, $a_{Xe} = 4 \cdot 10^{-8}$ см) и тем более в возбужденных состояниях. Параметр Na^3 , характеризующий это взаимодействие, достигает в ксеноне значения 0.2-0.3. Наконец, в высокотемпературной ($T > 3 \cdot 10^4$ К) плазме амплитуда кулоновского рассеяния электрона $f = Ze^2/kT$ сопоставима с характерными размерами ионов. Это приводит к некулоновскому характеру электронного рассеяния.

Эти условия достигаются при сжатии газа в сильных ударных волнах (на рис. 1.1 эти процессы обозначены H_1, H'_1, H_2, H'_2), а условия с более скромными параметрами - при адиабатическом сжатии (на рис:1.1 - S_1).

1.2.3 Плазма с ионами высокой кратности

При мощных импульсных энергокладах в конденсированное вещество возникает неидеальная сверхплотная плазма с многозарядными ионами. Плотности такой плазмы близки к плотностям конденсированного состояния, давление достигает нескольких ТПа, а температура - порядка десятков электрон-вольт. Плазма состоит из электронов и ионов высокой кратности, $Z \geq 10$. Расширяясь, она проходит целую гамму своеобразных состояний, в которых степень вырождения электронной компоненты также изменяется.

Сравнительно однородные объемы такой плазмы в лабораторных условиях создаются при сжатии пористых металлов (процессы на рис. 1.1) мощными ударными волнами ($n_e \lambda_e^3 \approx 0.5 \div 2$, $\gamma_{кв} = 10$, $\Gamma = 2$). При адиабатическом расширении ударно-сжатых металлов реализуется широкий диапазон плазменных состояний от сильносжатой металлической жидкости вплоть до слабоидеальной классической плазмы. Соответствующие состояния S_2 отмечены на рис. 1.1, они перекрывают всю область существования неидеальной плазмы.

Если электроны невырождены, то наблюдается три разных взаимодействия: ионное, ион-электронное и межэлектронное:

$$\gamma_{ZZ} = Z^2 e^2 n_i^{1/3} \beta, \quad \gamma_{Ze} = Ze^2 n_i^{1/3} \beta, \quad \gamma_{ee} = e^2 n_e^{1/3} \beta. \quad (1.16)$$

Если $Z \gg 1$, то, учитывая условие квазинейтральности, можно записать неравенства

$$\gamma_{ZZ} \gg \gamma_{Ze} \gg \gamma_{ee}. \quad (1.17)$$

Если электроны вырождаются, то их энергии взаимодействия следует соотносить с энергией Ферми (1.9). Ионы при этом остаются еще очень далекими от вырождения.

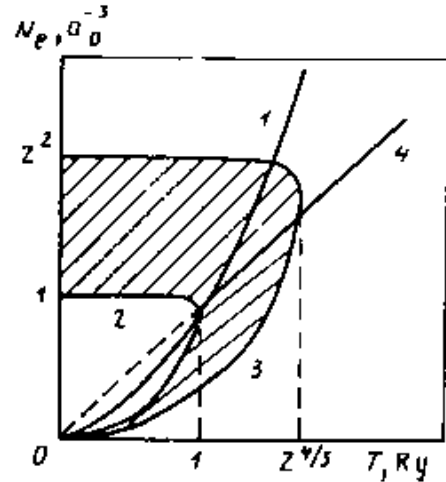


Рис. 1.4: Диаграмма параметров сильно сжатого вещества [84]: 1 - кривая вырождения электронов, 2 - $\gamma_{ee} = 1$, 3 - $\gamma_{Ze} = 1$, 4 - кривая равенства обменных + квантовомеханических эффектов корреляционным эффектам.

Поэтому

$$\gamma_{ZZ} = Z^2 e^2 n_i^{1/3} \beta, \quad \gamma_{Ze} = \frac{Z^2 e^2 n_i^{1/3}}{\varepsilon_F}, \quad \gamma_{ee} = \frac{e^2 n_e^{1/3}}{\varepsilon_F}$$

и иерархия (1.17) сохраняется. Отсюда следует возможность существования целого ряда интересных физических систем. Среди них - плазма, образованная квазикристаллической системой многозарядных ионов ($\gamma_{ZZ} \gg 1$), и идеального электронного газа ($\gamma_{ee} \ll 1$) с различной интенсивностью взаимодействия с ионами.

На диаграмме параметров сильносжатого вещества (рис. 1.4) заштрихована область, в которой энергия взаимодействия пары электронов мала по сравнению с их кинетической энергией. Однако электроны взаимодействуют с ядрами, а также с большим числом своих партнеров, находящихся в сфере эффективного действия кулоновских сил. Эти взаимодействия при $Z \gg 1$ отнюдь не малы. В заштрихованной области неоднородная плазма разбивается на вигнеровские ячейки и может быть описана методом Томаса-Ферми с поправками или методом функционала плотности энергии (термодинамического потенциала) [84].

1.3 Научно-технические приложения неидеальной плазмы

Плазма высокой плотности, в которой существенны эффекты неидеальности, реализуется во многих природных явлениях и технических устройствах. Это плазма электронов в твердых и жидких металлах, полупроводниках и электролитах, сверхплотная плазма вещества белых карликов. Солнца, глубинных слоев планет-гигантов Солнечной системы и космофизических объектов, для которых свойства плазмы определяют их структуру и эволюцию. При изучении планет-гигантов Солнечной системы в прямом и переносном смысле придется столкнуться с неидеальной плазмой, образующейся при гиперзвуковом движении космических аппаратов в плотных атмосферах этих планет.

В последнее время обострился и чисто прагматический интерес к изучению плазмы высокого давления в связи с реализацией ряда ответственных энергетических проектов и устройств, действие которых основано на импульсной локальной концентрации энергии в плотных средах. Неидеальная плазма представляется перспективным рабочим телом в мощных стационарных и импульсных МГД и взрывомагнитных генераторах, энергоустановках [15] и ракетных двигателях [203] с газофазным реактором, в устройствах плазмохимической промышленной технологии. Неидеальная плазма возникает при ядерных взрывах [197], при взрывном испарении лайнеров пинчей и магнитокумулятивных генераторов, при воздействии мощных ударных волн, лазерного излучения, электронных и ионных пучков на конденсированное вещество и во многих других случаях.

Особая потребность в физических характеристиках неидеальной плазмы возникает при реализации идеи импульсного термоядерного синтеза, осуществляемого путем лазерного, электронного, ионного или взрывного обжатия сферических мишеней [107], а также ответственных задач высокоскоростного удара.

Для физического анализа и расчета гидродинамических последствий такого рода воздействий определяющими являются сведения о физических характеристиках плазмы в обширной области фазовой диаграммы вещества от сильносжатого конденсированного состояния вплоть до идеального вырожденного и больцмановского

газов, включая кривую высокотемпературного кипения и окрестность критической точки.

В этом параграфе мы весьма кратко укажем наиболее показательные практические ситуации, в которых возникает и используется неидеальная плазма.

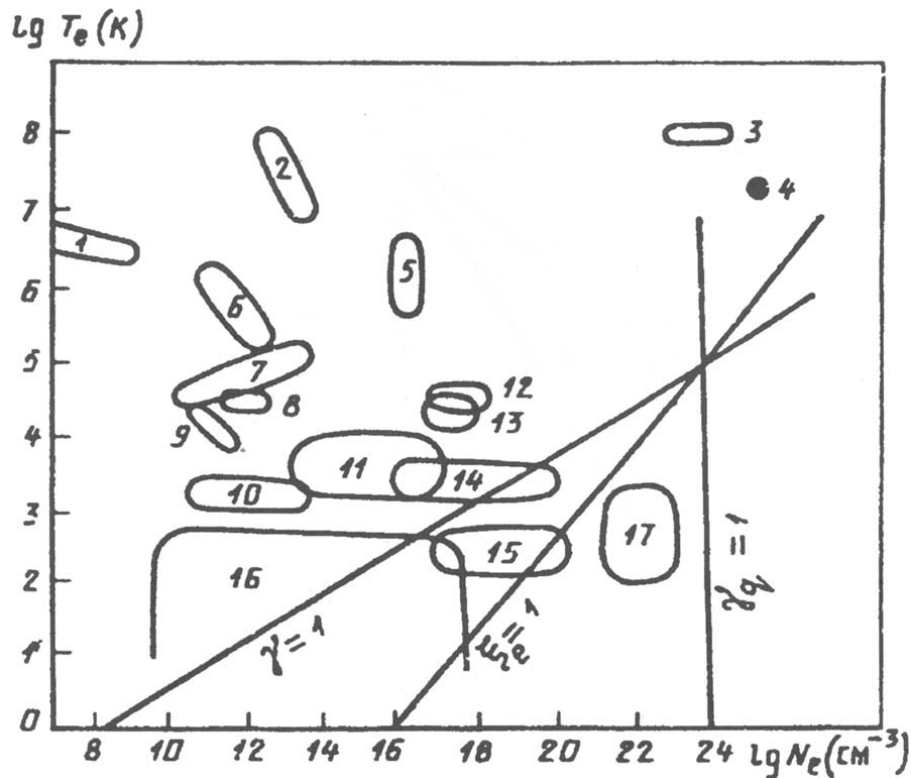


Рис. 1.5: Параметры плазмы, реализующиеся в различного типа системах: 1 - солнечная корона, 2 - токамак, 3 - лазерный термоядерный синтез, 4 - ядро Солнца, 5 - Z- и θ -пинч, 6 - стелларатор, 7 - газовые лазеры, 8 - плазмотрон, 9 - хромосфера Солнца, 10 - плазма продуктов сгорания углеводородных топлив, 11 - электрические дуги, 12 - катодное пятно, 13 - искра, 14 - МГД-генератор на неидеальной плазме, 15 - плазма полупроводников, 16 - металл-аммиачные растворы, 17 - металлы

Наиболее естественным примером неидеальной плазмы является плазма электронов проводимости в твердых и жидких металлах.

Речь идет о вырожденной плазме ($\varepsilon_F \gg kT$) с электронной концентрацией $n_e = 10^{22} \div 2,5 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$. В такой плазме реализуется сильное кулоновское взаимодействие, поскольку $2 \leq r_s \leq 5.6$. Действие мощных ударных волн на металлы позволяет сжать такую плазму в 3-4 раза, доведя максимальные значения n_e до $6 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ и температуру до $5 \cdot 10^5 \text{ К}$, приблизившись тем самым к границе вырождения.

Жидкие электролиты и в особенности растворы щелочных металлов в аммиаке [182] представляют собою сильнонеидеальную плазму в весьма широком диапазоне изменения параметров вырождения и взаимодействия. Это достигается варьированием доли растворенного в аммиаке металла. В этих условиях наряду с сильным, кулоновским взаимодействием в системе реализуется также и мощное взаимодействие заряд-нейтральная частица. Результатом этих взаимодействий являются необычные фазовые переходы и аномально высокие электропроводности, достигаемые при умеренных температурах еще при малых долях металла в растворе.

В собственных и примесных полупроводниках число электронов и дырок варьируется в широких пределах изменением температуры и концентрации примесей. При интенсивном световом облучении электроны, оптически возбужденные в зоне проводимости, образуют плазму. Межчастичное взаимодействие в ней может стать настолько сильным, что приводит к фазовому переходу - образованию экситонной жидкости.

Согласно оценкам, произведенным в работе [216], параметры плазмы железа в центре Солнца экстремально высоки: $\rho \approx 120 \text{ г/см}^3$, $T \approx 13 \cdot 10^6 \text{ К}$. Реализующийся при этих условиях параметр неидеальности $\gamma \approx 40$, по-видимому, все же недостаточен для кристаллизации. Расчеты методом молекулярной динамики дают границу кристаллизации $\gamma_c \approx 144$. Однако уже при меньших γ возможна частичная кристаллизация плазмы, что влияет, в частности, на оптические ее свойства, определяющие структуру Солнца.

Плазма экстремальных параметров реализуется на поздних стадиях эволюции звезд в так называемых белых карликах [71], потухающих звездах с массой, меньшей 1-1,2 массы Солнца. Вещество здесь находится в равновесном состоянии, когда давление квазиоднородного вырожденного газа уравнивает сжимающие звезду гравитационные силы. При высоких плотностях в такой плазме протекают пикноядерные реакции (при сжатии выше плотности, даваемой соотношением $\lg N \approx 34.2$), а при достаточно высоких температурах - термоядерные. Эффекты неидеальности увеличивают скорости ядерных реакций, определяя структуру, стабильность и эволюцию этих экзотических объектов.

При экспериментальном исследовании планет-гигантов Солнечной системы автоматическими кораблями возникнут совсем другие проблемы, связанные с неидеальной плазмой. Например, давление атмосферы Юпитера (смеси гелия и водорода) в нижних слоях достигает сотен МПа. При движении космического аппарата с гиперзвуковой скоростью в такой плотной атмосфере перед аппаратом образуется ударная волна, в которой происходит сжатие и необратимый нагрев плазмы до температур в десятки тысяч градусов при давлениях в десятки-сотни МПа [117]. Для организации эффективной защиты аппарата от воздействия этой плазмы, а также для обеспечения надежной радиосвязи необходимы сведения о термодинамических, транспортных и радиационных характеристиках сильнонеидеальной ударно-сжатой плазмы.

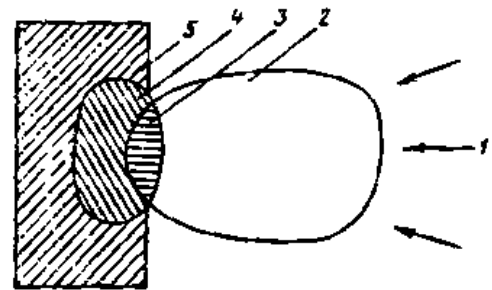


Рис. 1.6: Результат взаимодействия излучения с веществом: 1 - лазерный импульс, 2 - плазма короны ($\rho \leq 10^{-2} \text{ г/см}^3$, $kT \approx 1 \text{ кэВ}$), 3 - неидеальная плазма продуктов абляции ($\rho = 0.01 \div 1 \text{ г/см}^3$, $kT \approx 100 \text{ эВ}$), 4 - сверхплотное вещество ($\rho = 10 \div 50 \text{ г/см}^3$, $kT = 10 \div 100 \text{ эВ}$), 5 - холодное вещество нормальной плотности

Среди многочисленных технических применений неидеальной плазмы наиболее важные относятся к энергетике, так как с ионизованной плазмой высокой плотности связывается разработка и реализация целого ряда перспективных энергетических проектов. В настоящее время наряду с термоядерными системами магнитного удержания горячей плазмы развивается альтернативное направление-инерционный

управляемый термоядерный синтез [92]. При этом подходе термоядерная реакция осуществляется в форме "микровзрыва" в течение короткого (несколько наносекунд) времени, определяемого инерционным разлетом горячей плазмы. При этом понижение энергетического порога инициирования в системах инерционного синтеза достигается сжатием термоядерного горючего мишени до плотности, приблизительно в 1000 раз превосходящей плотность твердого тела. Для сжатия и нагрева смеси дейтерия и трития

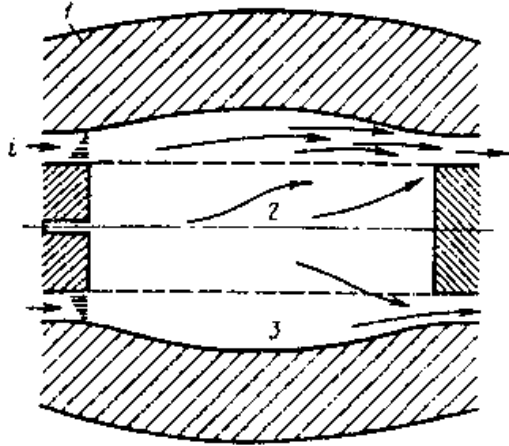


Рис. 1.7: Схема газозафазного ядерного реактора: 1 - делющаяся урановая плазма, 2 - поток рабочего тела, 3 - отражатель нейтронов

в сферических микромишенях предлагаются самые разнообразные возможности - мощное лазерное излучение, потоки релятивистских электронов, легких и тяжелых ионов, удар макроскопических лайнеров. При этом к сложной слоистой мишени размером 0,1 см за время 10^{-9} с необходимо подвести энергию порядка $10^5 - 10^6$ Дж. В результате возникает сложное нестационарное течение плотной неидеальной плазмы с давлением до 10 ТПа. Для расчета гидродинамики такого течения и создания оптимальных конструкций термоядерных микромишеней необходимы обширные данные о термодинамических, оптических и транспортных свойствах неидеальной плазмы различного состава, о чрезвычайно широком диапазоне давлений и температур.

Сильнонеидеальная плазма широкого диапазона параметров возникает и в других задачах расчета взаимодействия мощных импульсных источников излучения с веществом. Когда поверхность твердого вещества подвергается воздействию мощного лазерного импульса, возникает неоднородный плазменный факел, в котором реализуется широкий диапазон состояний. Сравнительно разреженная разогретая плазма ($n_e < 10^{21} \text{ см}^{-3}$, $kT \approx 1 \text{ кэВ}$) движется навстречу лазерному лучу и поглощает его энергию. Эта энергия переносится в область сильнонеидеальной плазмы ($n_e = 10^{21} \div 10^{23} \text{ см}^{-3}$), где тепло преобразуется в энергию гидродинамического движения. Сильная реакция отдачи сжимает материал мишени, в ней возникает область сверхплотного вещества ($n_e > 10^{23} \text{ см}^{-3}$) (рис. 1.6) [185].

На использование неидеальной плазмы ориентирован другой энергетический проект будущего - проект газозафазного ядерного реактора [77]. Это устройство представляет собой реактор полостного типа (рис. 1.7), в центре которого находится урановая плазма высокого давления. Между ураном и стенками протекает рабочее тело, нагреваемое тепловым излучением плазмы урана. Перемешивание рабочего тела и урана подавляется стабилизирующим магнитным полем, профилированием поля скоростей и другими мероприятиями. Такое устройство является основой для создания атомных электростанций, компактных космических энергоустановок, двигателей и т. п. [77]. Высокие температуры и требования критичности приводят к необходимости иметь в полости газозафазного реактора давление в сотни атмосфер. В этих условиях при температурах в десятки тысяч градусов рабочие тела (смеси щелочных металлов,

водород и т. п.) находятся в состоянии неидеальной плазмы.

Характерный для неидеальной плазмы высокий уровень коэффициента электропроводности при значительной сжимаемости делает ее перспективным рабочим телом магнетогидродинамических (МГД) генераторов [172], [167]. Принцип действия МГД-генератора предполагает движение проводящей среды в поперечном магнитном поле. Мощность, которую можно снять с единицы активного объема, при прочих равных условиях пропорциональна коэффициенту электропроводности.

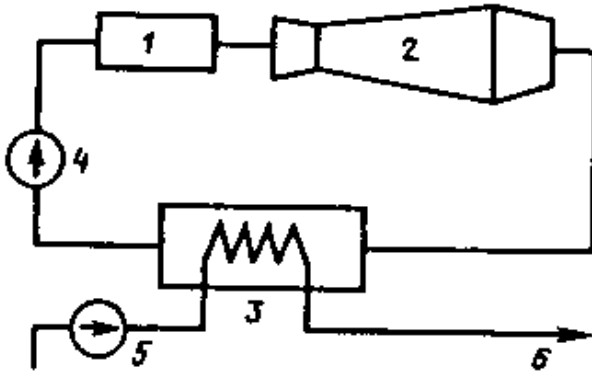


Рис. 1.8: Схема МГД-установки на парах щелочного металла: 1 - парогенератор, 2 - МГД-блок (сопло, МГД-канал, диффузор), 3 - теплообменник-конденсатор, 4 - насос жидкого металла, 5 - водяной насос, 6 - к турбогенератору

Неидеальная плазма возникает при значительных сжатиях так, что коэффициент электропроводности повышается в результате межчастичных взаимодействий. Поэтому коэффициент электропроводности неидеальной плазмы при сравнительно умеренных температурах может превышать на порядки коэффициент электропроводности идеальной плазмы.

Схема МГД-генератора закрытого цикла, использующего неидеальную плазму цезия и натрия, рассмотрена в [172]. С использованием ударно-сжатой неидеальной ксеноновой плазмы при давлении в несколько ГПа связывается [201] создание компактного

взрывного МГД-генератора с самовозбуждением магнитного поля.

В [36] предложена схема МГД-электростанции, в которой МГД - генератор работает в замкнутом цикле на неидеальной плазме насыщенных паров цезия или калия. Уровень термодинамических параметров цезия: $T \leq 1800 \text{ K}$, $\rho \leq 7 \text{ МПа}$. Установка работает по циклу Ренкина. Цикл, совершаемый щелочным металлом (рис. 1.8), состоит из нагрева и испарения в парогенераторе, расширения в МГД-блоке, конденсации в теплообменнике-конденсаторе, повышения давления в насосе.

Неидеальную плазму цезия можно также рассматривать как рабочее тело плазменных термоэлементов. Этому способствуют высокие значения термоЭДС ($S = 10^3 \text{ мкВ/К}$) при умеренных еще давлениях и температурах ($\rho \leq 10 \text{ МПа}$, $T \leq 2000 \text{ K}$) [12]. Элемент для термопреобразования представляет собой цилиндр из ниобия, в который вставлена трубка из оксида бериллия, куда заливают цезий. Сверху трубка закрывается металлической пробкой, служащей одним из электродов. Перепад температур создается печью сопротивления, которая помещается в защитный кожух под нужным давлением инертного газа. Мощность термоэлемента может достигать 10 Вт/см^2 , КПД - до 20%. Такие преобразователи имеют преимущество перед полупроводниковыми, так как способны сильно изменять свои характеристики при варьировании приложенного давления.

Примером сильнонеидеальной плазмы является плазма с конденсированной дисперсной фазой (КДФ). Она представляет собой низкотемпературную плазму, содержащую дисперсные частицы вещества в жидком или твердом состоянии. Частицы, эмитируя электроны и заряжаясь положительно, могут повысить концентрацию электронов в плазме. Частицы приобретают весьма, высокие заряды, $Z \approx 100$ для

частицы радиусом 0.1 мкм. Это приводит к сильному межчастичному взаимодействию, параметр $\gamma = -Z^2 e^2 N_p^{1/3} / kT \gg 1$. Оказывается, что в плазме КДФ в стандартных условиях ($T = 2000 \text{ К}$, $n_e = 10^8 \div 10^{14} \text{ см}^{-3}$) в зависимости от концентраций, размеров частиц реализуется весь диапазон плазменных состояний до сильнонеидеальной системы заряженных частиц [47].

Интерес к этой области физики плазмы постоянно поддерживается целым рядом приложений. Среди них - электрофизика продуктов сгорания ракетных топлив, технология плазменного напыления, технология обработки материалов лазерным и электронно-пучковым воздействиями. Частицы КДФ могут вводиться в плазму преднамеренно или возникать в результате объемной конденсации при истечении плазмы из сопел, при расширении сгустков вещества в пустоту, в продуктах абляции твердых поверхностей, подвергающихся воздействию мощных потоков энергии, и т. д.

Неидеальная плазма образуется при мощных электрических разрядах в жидкостях и твердых средах, и ее свойства определяют динамику движения порождаемых ударных волн. Они возникают при электрических взрывах тонких проволочек в конденсированных средах, при электрическом пробое жидких и твердых диэлектриков. Электрогидроимпульсные разряды находят широкое применение в промышленности для интенсификации механических и химико-технологических процессов [76]. В основе работы этих установок лежит использование высоковольтного разряда в жидкости как процесса быстрого преобразования энергии конденсаторной батареи в механическую работу. Длительность разряда $10^{-5} - 10^{-4} \text{ с}$, плотность энергии $10^{14} - 10^{15} \text{ Дж/м}^3$, температура $10^4 - 10^5 \text{ К}$, давление в канале разряда до 1 ТПа. В этих условиях свойства неидеальной плазмы, особенно ее коэффициента электропроводности, влияют как на процесс образования токопроводящего канала, так и на его расширение, на генерацию ударных волн.

Обзор электрических методов генерации неидеальной плазмы, выполненных в 60-80-х годах изложен в монографии [69]. В настоящем учебном пособии излагаются динамические методы генерации неидеальной плазмы и результаты, полученные в последние годы.

Глава 2

Экспериментальные методы в физике высоких давлений

2.1 Методы регистрации профилей давления

2.1.1 Манганиновые пьезорезисторы

Регистрация структуры волн сжатия и разрежения дает обширную информацию о процессах, сопровождающих динамическое нагружение вещества. С этой целью Разработан ряд методов непрерывного измерения механических напряжений и скорости вещества во внутренних сечениях образца или на контактных и свободных поверхностях [162].

Основным методом регистрации механических напряжений или давления в настоящее время является метод манганиновых датчиков [159], [160], [143], [28], [135], [80]. Впервые этот метод был использован для измерений давления в статических условиях П.Бриджменом [145], [146]. Применение манганиновых датчиков основано на высокой чувствительности удельного электросопротивления манганина к давлению при низкой чувствительности к изменениям температуры. Обычно датчик изготавливают в виде плоской зигзагообразной ленты толщиной 10 - 30 мкм занимающей площадь $\sim 0.1 - 1$ см. Образец делается составным, датчик закладывается между пластинами образца и, в случае необходимости, отделяется от них изолирующими прокладками (рис. 2.1). Во время измерений через датчик пропускается ток, с помощью осциллографа регистрируется падение напряжения на нем, которое возрастает с увеличением действующего на датчик давления. Для улучшения отношения сигнала к электрическим шумам и исключения перегрева датчика используются импульсные источники тока силой 5 - 10 А и длительностью ~ 100 мкс. Датчик включается в мост сопротивлений или используются другие дифференциальные схемы регистрации с тем, чтобы исключить постоянную составляющую сигнала, определяемую начальным сопротивлением датчика и тем самым повысить точность измерений. Двухточечная

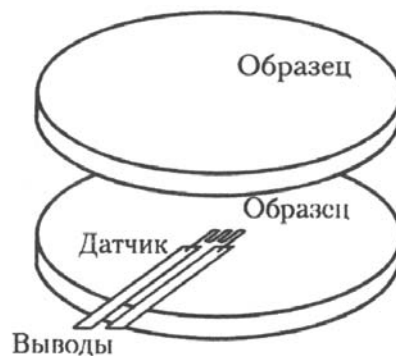


Рис. 2.1: Схема монтажа манганинового датчика в образце.

схема включения применяется для относительно высокоомных (5 - 50 Ом) датчиков. В ряде случаев целесообразно использовать датчики с начальным сопротивлением на уровне десятых - сотых долей Ома. Такие датчики обладают, в частности, тем преимуществом, что их показания менее чувствительны к шунтирующему влиянию электропроводности окружающей среды. Низкоомные датчики включаются в измерительную цепь по четырехточечной схеме.

Из-за разрушающего действия ударных волн невозможно прокалибровать каждый используемый датчик. По этой причине для определения давления используется единая зависимость относительного изменения электросопротивления $\Delta R/R_0$ от давления ударного сжатия, общая для всех датчиков из манганина данной марки. Калибровочная зависимость строится по результатам опытов с размещением датчиков в эталонных материалах с хорошо известной сжимаемостью. В сборках возбуждаются ударные волны, кинематические параметры которых определяются независимыми способами. Результаты таких измерений [181], [19], [81], [106] приведены в табл.13.3. Там же указаны значения остаточных приращений электросопротивлений датчиков после разгрузки $\Delta R_{\text{ост}}/R_0$.

Специальными измерениями показано [81], что в области давлений не ниже 7 - 10 ГПа изменение сопротивления манганина практически обратимо и не зависит от того, является ли динамическое сжатие ударным, ступенчатым или изоэнтропическим. Разгрузка до нулевого давления сопряжена с небольшим гистерезисом показаний манганиновых датчиков. Необратимая составляющая приращения электросопротивления манганина связывается с наклепом материала при ударно-волновом сжатии и не превышает 2,5% от начального сопротивления. Отжиг манганина приводит к возрастанию амплитудных значений и гистерезиса показаний датчиков на одну и ту же величину.

Зависимость электросопротивления от давления для манганина марки МН-МЦАЖ 3-12-0,25-0,2 показана на рис. 2.3. Вычитание из экспериментальной зависимости 1 необратимой компоненты изменения сопротивления дает кривую 2, близкую к результатам измерений при гидростатическом сжатии (рис. 2.3б).

Поскольку для проведения измерений в образец наряду с датчиками вводятся прокладки изолирующего материала, показания датчиков могут иметь некоторую инерционность. Искажения определяются временем установления (в процессе многократных отражений волн в прокладках) давления в изоляции, равного сжимающему напряжению в окружающей среде в направлении, перпендикулярном плоскости датчика. Инерционность особенно значительна при регистрации волн малой интенсив-

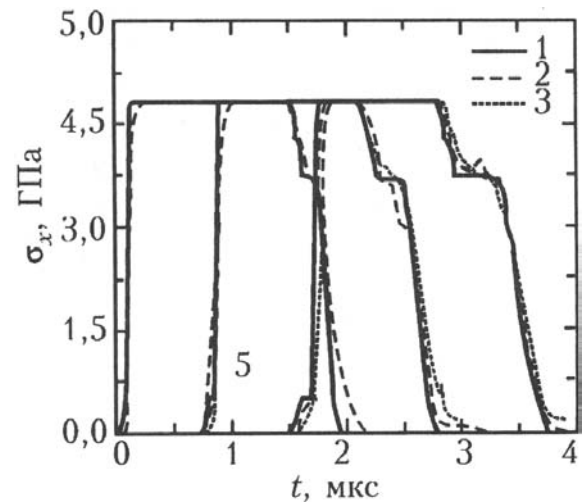


Рис. 2.2: Результаты численного моделирования эволюции ударных волн в упругопластическом материале (алюминий АД 1) в условиях регистрации профилей давления датчиками, расположенными с изоляцией внутри образца: 1 - образец без прокладок, 2 - образец с прокладкой изоляционного материала (фторопласт), 3 - образец с двумя изолирующими прокладками. Указаны расстояния от поверхности соударения.

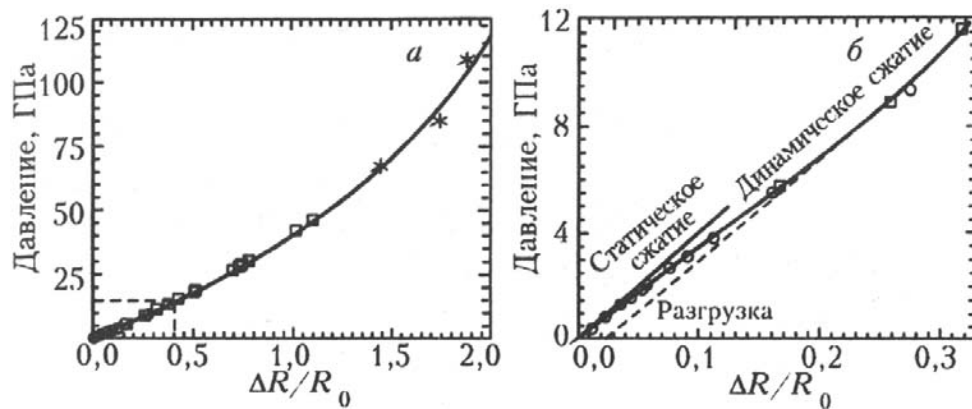


Рис. 2.3: Связь между давлением в ударной волне и относительным изменением сопротивления манганиновых датчиков.

ности. Численное моделирование эволюции импульсов нагрузки в упругопластическом теле с жидкоподобными прокладками [58] показывает, что инерционные искажения с характерным временем 0.1мкс вносят систематическую погрешность (рис. 2.2). С ростом давления искажения регистрируемого профиля уменьшаются вследствие возрастания скорости звука в изолирующих прокладках. При регистрации волновых профилей одновременно в двух и более сечениях образца искажения накапливаются от датчика к датчику. Таким образом, наибольшая точность измерений достигается при установке одного или нескольких датчиков в одном сечении образца с подбором изолирующих прокладок минимальной толщины. Проблема накопления искажений при установке датчиков в нескольких сечениях образца решается [215] размещением нескольких датчиков в одном косом сечении (рис. 2.4).

Очевидно, что электросопротивление датчика изменяется не только под влиянием давления, но и в результате деформации чувствительного элемента. В условиях неоднородного нагружения изменение длины чувствительного элемента датчика приводит к появлению дополнительного приращения электросопротивления. Для разделения этих факторов проводят измерения с использованием материалов с существенно различными зависимостями электросопротивления от давления. Тогда, имея две осциллограммы и две неизвестные величины - давление и длина чувствительного элемента, нетрудно рассчитать реальный профиль давления $p(t)$. С этой целью применяются датчики из константана, пьезокоэффициент электросопротивления у которого значительно ниже, чем у манганина [80].

При размещении манганинового и константанового датчиков в одном сечении тела их электросопротивления в один и тот же момент

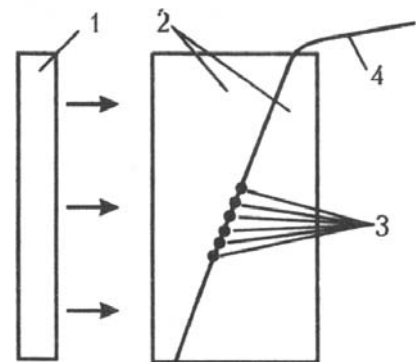


Рис. 2.4: Схема размещения нескольких манганиновых датчиков в одном косом сечении образца: 1 - ударник, 2 - составной образец, 3 - чувствительные элементы датчиков, 4 - изолирующие пленки и выводы датчиков.

Р, ГПа	$\Delta R/R_0$	$\Delta R_{ост}/R_0(p=0)$	Литература, марка манганина
0.428 ± 0.002	0.0105 ± 0.0001		[181]
0.89 ± 0.002	0.0219 ± 0.0004		манганин с составом
1.36 ± 0.01	0.0345 ± 0.0005		84%Si, 12%Mn, 4%Ni
1.6 ± 0.01	0.0429		
1.9 ± 0.03	0.0516 ± 0.013		
2.1	0.0560		
2.71	0.0749		
3.14	0.0898		
3.81	0.1120		
5.53	0.1608		
9.39	0.2742		
5.8 ± 0.2	0.167 ± 0.005	0.016 ± 0.002	[19], [81] Твердая
8.9 ± 0.2	0.257 ± 0.005	0.018 ± 0.003	манганиновая фольга
11.6 ± 0.2	0.318 ± 0.005	-	МНМцАЖ 3-1 2-0.25-0.2
13.5 ± 0.5	0.373 ± 0.007	0.015 ± 0.002	
15.6 ± 0.3	0.426 ± 0.008	0.015 ± 0.005	
18.1 ± 0.4	0.504 ± 0.01	0.021 ± 0.004	
18.9 ± 0.4	0.512 ± 0.015	0.020 ± 0.005	
26.8 ± 0.8	0.698 ± 0.01	0.018 ± 0.007	
28.3 ± 0.6	0.732 ± 0.01	-	
28.9 ± 0.6	0.743 ± 0.01	0.017 <i>pm</i> 0.08	
30.4 ± 1	0.780 ± 0.028	-	
42.2 ± 1.5	1.010 ± 0.025	-	
46.5 ± 1.5	1.100 ± 0.015	-	
66.7 ± 2.5	1.445 ± 0.015	-	[106] Твердая
85.5 ± 5	1.730 ± 0.02	-	манганиновая фольга
109.0 ± 3.3	1.880 ± 0.02	-	МНМцАЖ 3-1 2-0. 25-0.2
11.2	0.01 ± 0.0005		[80], [59], [60] Константам
16.5	0.021 ± 0.001		МНМц 40-1.5
18.3	0.022 ± 0.001		
21.5	0.022 ± 0.001		
29.5	0.063 ± 0.003		

Таблица 2.1: Результаты измерений калибровочной зависимости манганина и константана

ударно-волнового процесса можно представить в виде:

$$R_m = R_m \alpha_1 \alpha_{pm}, \quad R_c = R_{0c} \alpha_1 \alpha_{pc}, \quad (2.1)$$

где $R_m = R_{0m}$, $R_c = R_{0c}$ - текущие и начальные значения электросопротивления манганинового и константанового датчиков, $\alpha_1 = (R/R_0)_p$ - фактор удлинения датчиков, принимаемый равным для манганина и константана, $\alpha_{pm} = (R_m/R_{0m})_1$ и $\alpha_{pc} = (R_c/R_{0c})_1$ - компоненты приращения электросопротивления, определяемые действующим давлением при фиксированной длине датчиков. Тогда:

$$\frac{R_m}{R_{0m} \alpha_{pm}} = \frac{R_c}{R_{0c} \alpha_{pc}} \quad (2.2)$$

Если зависимость $\alpha_{pm}(p)$ и $\alpha_{pc}(p)$ в некотором диапазоне давлений можно представить в линейном виде:

$$\alpha_{pm} = \alpha_{0m} + K_m p, \quad \alpha_{pc} = \alpha_{0c} + K_c p, \quad (2.3)$$

то α_{pm} и α_{pc} будут связаны между собой выражением:

$$\alpha_{pc} = \frac{K_c}{K_m} (\alpha_{pm} + \alpha_{0m}) + \alpha_{0c}. \quad (2.4)$$

Подставив (6.20) в (2.2), получим:

$$\alpha_{pm} = \frac{(R_{0c}/R_{0m})(\alpha_{0c} - \alpha_{0m} K_c / K_m)}{R_c / R_m - R_{0c} K_c / R_{0m} K_m}.$$

Тем самым определяется действующее на датчик давление в данный момент времени. Изменение длины датчика в этот момент без учета упругопластических свойств материалов определяется соотношением:

$$\frac{l}{l_0} = \sqrt{\alpha_1} = \sqrt{\frac{R_c}{R_{0c} \alpha_{pc}}}$$

Описанный метод использовался, в частности, для измерений профилей давления в цилиндрических вставках, расположенных на оси детонирующего заряда ВВ [59]. В этих условиях детонационная волна, скользящая вдоль образующей цилиндра, возбуждает в нем коническую сходящуюся ударную волну. Отражение конической ударной волны на оси цилиндра имеет нерегулярный характер и сопровождается образованием вогнутого Маховского диска [8]. На некотором расстоянии процесс стабилизируется - в цилиндрической вставке образуется стационарная ударно-волновая конфигурация, имеющая форму, близкую к усеченному конусу, и распространяющаяся со скоростью детонации заряда ВВ.

Измерения профилей давления при нерегулярном отражении конической ударной волны проведены в цилиндрических вставках из оргстекла, размещенных на оси

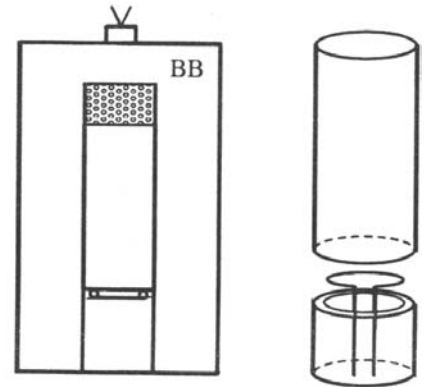


Рис. 2.5: Схема измерений профилей давления при нерегулярном отражении конической ударной волны, генерируемой в цилиндрах из оргстекла детонацией заряда ВВ.

зарядов из гексогена. Схема измерений показана на рис. 2.5. Чувствительные элементы датчиков выполнялись в виде незамкнутых колец и располагались в образце коаксиально с тем, чтобы обеспечить синхронность нагружения. Результаты измерений, представленные на рис. 2.6, показали, что, в отличие от классического режима нерегулярного отражения сильных ударных волн, волновая конфигурация в данном случае не содержит отраженной ударной волны.

Манганиновые датчики давления нашли широкое применение в экспериментах с ударными волнами. С их помощью проводятся измерения при пониженных (до 77 К) и повышенных (до 600 К) начальных температурах образцов [108], [19]. Исследуются упруго-пластические свойства и полиморфные превращения веществ, эволюция импульсов сжатия в реагирующих взрывчатых материалах, определяются параметры динамической нагрузки в технологических условиях взрывной обработки.

Следует отметить, что манганин - единственный пьезорезистивный материал, используемый в качестве датчиков давления. В области низких давлений (до 15 - 20 кбар) применяются иттербиевые датчики, пьезочувствительность которых значительно выше, чем у манганина. Область применения иттербия ограничена полиморфным превращением [105] при давлении около 4 ГПа.

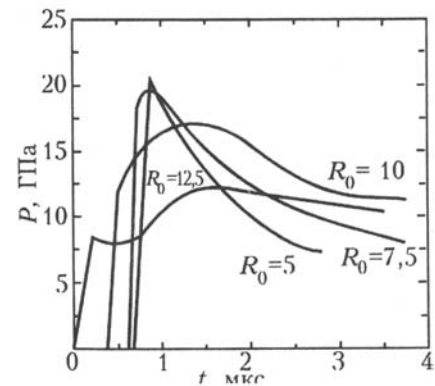


Рис. 2.6: Результаты измерений профилей давления при нерегулярном отражении конической ударной волны в плексигласовых цилиндрах, размещенных на оси зарядов из гексогена

2.1.2 Кварцевые датчики давления

Пьезоэлектрический эффект при сжатии монокристаллического кварца вдоль оси x хорошо известен и широко используется для измерений давлений как в квазистатических условиях, так и в условиях относительно быстро-протекающих процессов баллистики и ракетной техники. Для ударно-волновых измерений кварцевые датчики используются как устройства, регистрирующие давление на контактной поверхности в условиях одномерного нагружения [163], [164]. Обычно датчик представляет собой диск синтетического кварца, плоскость которого ориентирована перпендикулярно оси x . Металлизированные плоскости датчика являются обкладками конденсатора, заряжаемого пьезоэлектричеством кварца. В отличие от квазистатических применений, где измеряемой величиной является заряд на обкладках, в случае ударно-волновых измерений датчик включается в измерительную цепь на низкоомную нагрузку и работает как источник тока.

Диапазон измеряемых давлений для кварцевых датчиков составляет примерно 4 ГПа. Хотя динамический предел упругости монокристаллического кварца данной ориентации составляет примерно 6 ГПа, при напряжениях выше 4 ГПа наблюдается ускоренная электрическая релаксация, связанная, по-видимому, с инициированием разрушения.

Датчик устанавливается на поверхность образца. Ударная волна в образце переходит через контактную поверхность в датчик и вызывает появление в нем упругой волны соответствующей амплитуды, профиль которой отражает структуру волны в

образце. Упругая волна в кварце вызывает диэлектрическую поляризацию материала. Индуцированный поляризацией заряд стекает с обкладок через сопротивление нагрузки - во внешней цепи появляется ток, сила которого примерно пропорциональна мгновенной разности механических напряжений на противоположных поверхностях датчика. Основное соотношение для связи между регистрируемым сигналом и давлением на контактной поверхности между датчиком и образцом есть [163]:

$$U(t) = \frac{k_0 R - e A c_l}{x_0} \cdot p_i(t), \quad t \leq \frac{x_0}{c_l},$$

где $k_0 = 2.01 \text{ нК/мм}^2 \text{ ГПа}$ - пьезоэлектрический коэффициент кварца, R_e - эффективное сопротивление нагрузки, A - площадь измерительного электрода, $c_l = 5.72 \text{ км/с}$ - скорость упругой волны в кварце данной ориентации, x_0 - толщина датчика, $p_i(t)$ - давление на контактной поверхности. Соотношение получено в предположениях, что деформация датчика строго одномерна, датчик работает в короткозамкнутом режиме, его диэлектрическая проницаемость постоянна, а электропроводность отсутствует, зависимость скорости распространения механических возмущений в кварце от сжимающего напряжения и изменение толщины датчика несущественны, пьезоэлектрическая поляризация прямо пропорциональна механическому напряжению и электрическое поле в датчике ориентировано строго перпендикулярно электродам. Более точная обработка осциллограмм учитывает дисперсию звука, деформацию датчика, нелинейность зависимости поляризации от напряжения и неоднородность электрического поля в межэлектродном промежутке.

Профиль давления на поверхности контакта между датчиком и образцом фиксируется в течение времени прохождения упругой волны сквозь датчик, то есть, обычно, в течение 0.5-1.5 мкс. Волновой профиль в образце рассчитывается затем по измеренному профилю $p_i(t)$ с учетом соотношения динамических импедансов образца и датчика.

Интересна схема измерений, в которой осуществляется соударение кварцевого датчика с образцом. В этом случае имеется уникальная возможность измерения механического напряжения непосредственно на поверхности соударения. Подобная схема экспериментов реализуется на баллистических установках. В этом случае датчик устанавливается на снаряд вместо плоского ударника. Возможна и обратная ситуация, когда датчик является мишенью при соударении, а на месте ударника находится образец. Так как в методе кварцевого датчика нет процессов установления механического равновесия между датчиком и образцом, временное разрешение метода оказывается высоким и составляет практически примерно 10 нс.

2.1.3 Диэлектрические и сегнетоэлектрические датчики давления

Диэлектрический датчик давления [115] представляет собой плоский конденсатор, состоящий из тонких металлических обкладок и пленки диэлектрика между ними, которая, по существу, является чувствительным элементом датчика. Применение диэлектрического датчика основано на регистрации изменения его электрической емкости при сжатии. Предполагается, что изменение емкости датчика обусловлено изменением толщины пленки и ее диэлектрической постоянной, а процессами ударной поляризации можно пренебречь.

Датчик располагается внутри испытуемого образца и включается в высокоомную измерительную цепь с тем, чтобы постоянная времени разряда конденсатора была много выше длительности регистрируемого процесса. На датчик подается начальное поляризующее напряжение, достаточно высокое, чтобы вклад ударной поляризации не оказывал заметного влияния на результаты измерений. При высокоомной нагрузке заряд на обкладках сохраняется практически постоянным, а изменение разности потенциалов на них пропорциональны изменению емкости измерительного конденсатора.

Для определения связи между относительным изменением емкости датчика $\Delta C/C$ и давлением построены калибровочные зависимости - своя для каждого вещества диэлектрической пленки. Способ построения калибровочных зависимостей аналогичен применявшемуся для манганиновых датчиков. Сигнал диэлектрического датчика линейно возрастает с ростом начальных емкости и напряжения, независимо от толщины диэлектрика.

Диэлектрические датчики обладают более высокой чувствительностью, чем манганиновые пьезорезисторы, и имеют некоторые преимущества перед последними в области малых давлений.

В отличие от диэлектрических датчиков, сегнетоэлектрические датчики давления не требуют источника питания, а располагают запасом энергии, которая выделяется при сжатии. Активно изучаются различные метрологические аспекты датчиков на основе пленок $PVDF_2$ - поливинилиденфторида [141], [122]. Поливинилиденфторид - это полукристаллический (примерно на 50%) полимер, мономер которого есть $CH_2 - CF_2$. Материал становится пьезоэлектрическим и проявляет сегнетоэлектрические свойства после растяжения и воздействия медленно изменяющегося (~ 0.01 Гц) сильного электрического поля. Его остаточная поляризация достигает ~ 10 мкКл/см², а пьезоэлектрический коэффициент ~ 22 пКл/Н.

Поливинилиденфторидная пленка толщиной 10 - 30 мкм используется в качестве активного элемента датчиков давления в ударных волнах. Пленка размещается между тонкими металлическими обкладками, соединенными с выводами. Обычно диаметр такого конденсатора составляет 3 - 5 мм. Датчик размещается в образце и ориентируется параллельно фронту ударной волны. При прохождении ударной волны через плоскость датчика происходит изменение поляризации поливинилиденфторида и на обкладках появляется электрический заряд. Для регистрации электрического сигнала датчика применяют резистивную или резистивно-емкостную нагрузку, с помощью которых регистрируется ток разряда или непосредственно текущая величина заряда на обкладках. В случае резистивной нагрузки текущее значение заряда на обкладках получается интегрированием осциллограммы тока. Оба режима регистрации дают в результате величину заряда, который выделяется на единице площади датчика, затем с использованием калибровочной зависимости по величине заряда рассчитывается давление. Зависимость между давлением и образовавшимся зарядом нелинейна и согласно [122] описывается соотношением $p = 1,12Q^{1,58}$.

2.2 Методы регистрации профилей скорости

В отличие от измерений давления, методы определения скорости вещества имеют первичный характер, не связаны с построением тарировочных зависимостей, поэтому

от них следует ожидать более высокой точности. Основными современными методами непрерывной регистрации ударно-волновых профилей массовой скорости являются метод емкостного датчика, магнитоэлектрический метод и лазерные доплеровские методы.

2.2.1 Дискретные методы измерения скоростей

подавляющее большинство данных об ударной сжимаемости конденсированных сред получено с помощью дискретных методов измерения волновых и массовых скоростей, основанных на применении электроконтактных датчиков или вспыхивающих газовых зазоров.

Электроконтактными датчиками фиксируются моменты прохождения ударной волны или поверхности тела через реперные точки базы измерения D или u . При замыкании электроконтактного датчика простейшей электрической схемой вырабатывается импульс тока, который регистрируется электронным осциллографом. По полученным осциллограммам определяются промежутки времени между моментами срабатывания нескольких датчиков, установленных на пути ударной волны в образце или на пути движения свободной поверхности. Расстояние между датчиками измеряется с высокой точностью, поэтому по измеренным интервалам времени легко находится скорость ударной волны или скорость движения поверхности образца либо ударника. Установкой многих датчиков в одном опыте обеспечивается фиксация возможных перекоса и искривления волнового фронта, что после введения соответствующих поправок повышает точность измерений. В зависимости от конструкции датчиков разброс моментов их срабатывания может составлять 1 - 10 нс. Дополнительную погрешность в результаты измерений вносит искажение сигналов в регистрирующей аппаратуре и соединительных кабелях.

Метод вспыхивающих зазоров основан на использовании тонких (~ 50 мкм) газовых зазоров между блоком оргстекла, через который ведется наблюдение, и поверхностью образца. Под действием ударной волны газ в зазоре адиабатически сжимается и нагревается. Вспышки газа в зазорах фиксируются скоростным фоторегистратором (фотохронографом), работающим в режиме щелевой развертки. Длительность вспышки составляет обычно 10 - 50 нс в зависимости от толщины зазора. Для получения высокой яркости свечения применяют продувку зазоров аргоном. При интенсивности ударной волны в сотни килобар и более хорошие результаты дает использование воздушных зазоров. Сборка с образцом изготавливается в виде нескольких ступенек, так что вспыхивающие зазоры размещены на различных расстояниях по ходу ударной волны.

2.2.2 Емкостные датчики скорости

Метод емкостного датчика предназначен для фиксации скорости поверхности металлических образцов [74]. Пример постановки опыта с применением емкостного датчика показан на рис. 2.7. На расстоянии x_0 от поверхности образца устанавливается плоский электрод, составляющий с образцом измерительный конденсатор C_m . Напряжение E на конденсатор подается от источника ЭДС через сопротивление нагрузки $R_{вх}$, величина которого выбирается достаточно малой с тем, чтобы постоянная времени $R_{вх} C_m$ была много меньше характерного времени регистрации. Для поддержания од-

нородности электрического поля в области измерительного электрода применяется охранное кольцо.

Когда поверхность образца приходит в движение, емкость измерительного конденсатора начинает изменяться и в цепи датчика появляется ток подзарядки, сила которого пропорциональна скорости изменения емкости, то есть скорости движения поверхности образца W :

$$i(t) = U \frac{dC_m}{dt} = \frac{\varepsilon AU}{4\pi x^2(t)} \frac{dx}{dt} = \frac{\varepsilon AU}{4\pi x^2(t)} W(t)$$

где U - напряжение на источнике ЭДС, ε - диэлектрическая постоянная, A - площадь измерительного электрода, x - расстояние между обкладками в момент времени t , рассчитываемое интегрированием скорости в процессе обработки экспериментальной осциллограммы $i(t)$.

Метод является бесконтактным, поэтому его разрешающая способность ограничена, в принципе, лишь разновременностью выхода регистрируемого импульса нагрузки на поверхность образца в контролируемой датчиком области. В зависимости от требуемых разрешающей способности и полного времени регистрации диаметр измерительного электрода и расстояние между ним и поверхностью образца варьируется в пределах 5 -25мм и 1 -6мм соответственно. Реальная разрешающая способность датчика диаметром 5мм составляла в опытах 10 -20 нс. При напряжении на источнике, равном 3 кВ, характерный уровень сигнала емкостного датчика составляет единицы-десятки милливольт. С низким уровнем сигнала связана недостаточно высокая помехоустойчивость метода, что ограничивает возможности его применения.

2.2.3 Магнитоэлектрический метод

Регистрация профилей массовой скорости в диэлектрических материалах проводится магнитоэлектрическим методом [1], [61]. С этой целью в образце устанавливается П-образный датчик из тонкой алюминиевой фольги. Экспериментальная сборка размещается в однородном магнитном поле таким образом, чтобы "перекладина" датчика, являющаяся его чувствительным элементом, была перпендикулярна направлению силовых линий поля и параллельна фронту ударной волны (рис. 2.8). В импульсе нагрузки датчик увлекается в движение вместе с окружающим его веществом. При этом на его выводах наводится ЭДС магнитной индукции: $U_m(t) = -u(t)Bl_g$, где l_g -длина "перекладины" датчика (обычно ~ 10 мм), B - магнитная индукция поля (~ 1 Тесла). Магнитоэлектрический метод регистрации профилей массовой скорости широко используется в экспериментах со взрывчатыми веществами. В качестве источников магнитного поля используются как стационарные, так и импульсные одноразовые соленоиды.

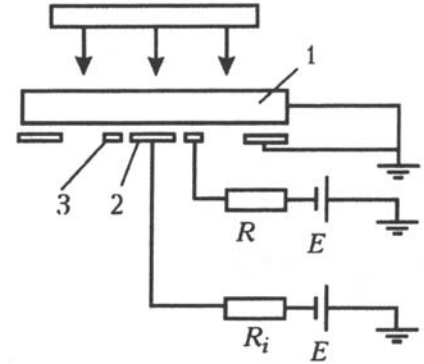


Рис. 2.7: Схема опытов по регистрации скорости свободной поверхности образцов методом емкостного датчика: 1-нагружаемый образец, 2 - измерительный электрод, 3 - охранное кольцо емкостного датчика, E-источник ЭДС (конденсатор большой емкости), R-сопротивление нагрузки.

Значительно более компактный вариант магнитоэлектрического метода представляет собой осесимметричный магнитный датчик скорости [156], где используется постоянный твердотельный магнит. Осесимметричный датчик регистрирует движение металлической поверхности в неоднородном магнитном поле. Методика использовалась для измерений профилей массовой скорости в изоляторах, продуктах взрыва (в этих случаях фиксировалась скорость металлической фольги, размещенной внутри образца), а также для регистрации скорости движения поверхности металлической пластины. Принцип измерений заключается в следующем.

На оси образца на некотором удалении z_s от контролируемой поверхности размещается компактный керамический магнит. При движении в неоднородном магнитном поле этого источника в проводнике возникают вихревые токи, что приводит к изменению поля. Коаксиально магниту на расстоянии z_c от контролируемой поверхности установлен индуктивный датчик, представляющий собой кольцевой виток провода с радиусом r_c . Переменное магнитное поле наводит в датчике ЭДС индукции, по результатам регистрации которой может быть определена скорость движения плоского проводника. Искомый профиль скорости находится путем численного решения полной электродинамической задачи, исходными данными для которой, помимо измеренного сигнала электромагнитной индукции, являются величины z_s , z_c , r_c и пространственное распределение потока магнитной индукции в конкретных условиях эксперимента. Погрешность метода оценивается в - 2%, предельная разрешающая способность - 1 нс на 1 см диаметра индуктивного датчика (без учета отклонений фронта ударной волны от плоскости датчика).

Пространственное разрешение методов регистрации волновых профилей манганиновыми, емкостными и магнитоэлектрическими датчиками ограничено размерами чувствительных элементов. В лучшем случае это несколько миллиметров в плоскости фронта ударной волны. Так как фиксация волновых профилей проводится прямым осциллографированием, точность определения текущих параметров состояния вещества ограничена погрешностью амплитудных измерений регистрирующей аппаратуры. Существенно более высокими пространственно-временным разрешением и точностью измерений обладают методы регистрации движения свободных и контактных поверхностей с применением лазерной техники.

2.2.4 Лазерные доплеровские измерители скорости

Применение лазеров для измерений скорости вещества в экспериментах с ударными волнами основано на использовании эффекта Доплера. Так как при скорости движения отражающей поверхности $\sim 100 - 1000$ м/с эффект весьма мал (сдвиг длины волны излучения составляет $\sim 10^{-3} - 10^{-2} \text{ \AA}$), то для его фиксации используются двух лучевые или многолучевые интерферометры. При этом измерения принимают дифференциальный характер, что существенно повышает их точность. Высокое пространственное разрешение лазерных методов обеспечивается тем, что зондиру-

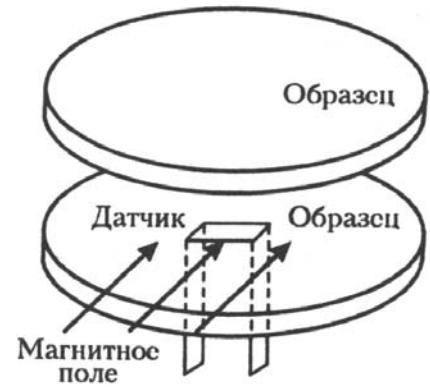


Рис. 2.8: Схема регистрации профилей массовой скорости магнитоэлектрическим методом.

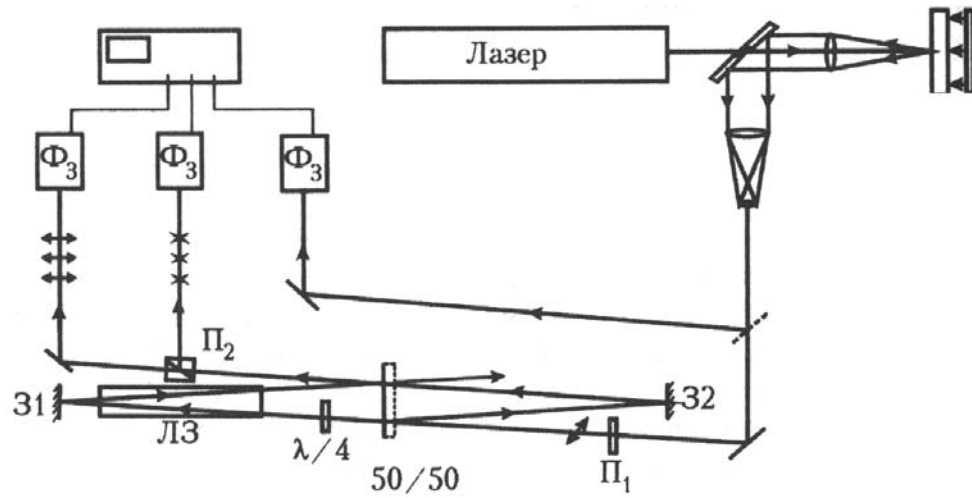


Рис. 2.9: Схема регистрации волновых профилей лазерным доплеровским измерителем скорости: $З_1, З_2$ - 100%-е концевые зеркала, 50/50 - 50%-й светоделитель, ЛЗ - стеклянная линия задержки, $П_1$ - поляризатор, ориентированный под углом 45° к горизонтали, $П_2$ - поляризационный светоделитель, $\lambda/4$ - четвертьволновая пластина, $Ф_1, Ф_2$ - фотоприемники выходного излучения, $Ф_3$ - фотоприемник контроля интенсивности.

ющее излучение лазера фокусируется на исследуемом образце в пятно диаметром ~ 0.1 мм.

На рис. 2.10 приведена схема лазерного доплеровского измерителя скорости VISAR [140], [139]. Фиксация изменений скорости отражающей поверхности с его помощью производится путем регистрации периодических изменений интенсивности (биений) при интерференции двух лучей когерентного света с близкими длинами волн. В данном случае интерферируют лучи света, отраженного от движущейся поверхности в разные моменты времени. Если скорость отражающей поверхности изменяется, то, вследствие сдвига по времени, величина эффекта доплера для интерферирующих лучей оказывается различной. Регистрируемые фотоприемниками биения интенсивности имеют частоту, пропорциональную ускорению отражающей поверхности и величине относительного сдвига по времени.

Идея метода реализована в приборе следующим образом. Излучение одночастотного лазера фокусируется на поверхности образца. Отраженный от контролируемой поверхности свет собирается линзой в квазипараллельный пучок и направляется в интерферометр. После сужения во входном телескопе пучок отраженного света расщепляется светоделителем на два луча равной интенсивности, которые направляются в оптически симметричные "плечи" интерферометра. Одно из плеч содержит стеклянную линию задержки, вследствие чего время двукратного прохождения света в этом плече больше, чем в противоположном, на некоторую величину Δt . После отражения от концевых зеркал оба луча возвращаются на светоделитель, где и происходит их интерференция. Для выполнения требования параллельности волновых фронтов рекомбинирующих лучей геометрические пути света в двух плечах интерферометра должны различаться на строго определенную величину $\Delta l = l_d(1 - 1/n)$, где l_d, n - длина и показатель преломления линии задержки. В этом случае время задержки равно $\Delta l = 2l_d/c(n - 1/n)$, где c - скорость света в вакууме. Вследствие оптической

симметрии данного интерферометра пространственная когерентность анализируемого излучения не требуется. Хороший интерференционный контраст получается даже при работе со светом, отраженным от рассеивающей, шероховатой поверхности, когда входящий в интерферометр пучок имеет пятнистую поперечную структуру.

Текущее значение монотонно изменяющейся скорости отражающей поверхности $W(t)$ определяется по числу зарегистрированных фотоприемниками биений интенсивности света $N(t)$ из соотношения [139]:

$$W(t) = \frac{\lambda}{2\Delta t} \frac{N(t)}{1 + \delta}, \quad \delta = \frac{n}{n^2 - 1} \lambda \frac{dn}{d\lambda},$$

где λ - длина волны зондирующего излучения, n - показатель преломления стекла линии задержки, N может быть нецелым числом.

Для надежной фиксации изменений знака ускорения при немонотонном изменении $W(t)$ в приборе предусмотрена система поляризационного кодирования. Перед расщеплением в большом светоделителе пучок отраженного от образца света поляризуется под углом 45° к горизонтали. Одно из плеч интерферометра содержит четверть-волновую пластину, в которой происходит сдвиг приблизительно на 90° фазы вертикально поляризованного света относительно горизонтальной компоненты. После рекомбинации лучей на выходе из интерферометра пучок света расщепляется поляризационным светоделителем на две компоненты с вертикальной и горизонтальной поляризацией. Двумя фотоприемниками независимо регистрируются биения интенсивности каждой компоненты, которые оказываются также сдвинутыми по фазе друг относительно друга на 90° . В результате смена знака ускорения неизбежно будет зафиксирована по крайней мере одним фотоприемником по смене (вне экстремумов биений) знака изменения светового потока.

Изменение светового потока на выходе из интерферометра связано с изменением скорости отражающей поверхности синусоидальной зависимостью. Исходя из этого, текущие значения скорости могут быть определены из экспериментальных осциллограмм не только дискретно - подсчетом числа биений, но и измерением мгновенных значений относительных световых потоков в каждом канале регистрации в пределах отдельных биений. Благодаря контролю интенсивности попадающего в прибор света и поляризационному кодированию погрешность измерений скорости, превышающей величину $\lambda/2\Delta t$, может быть снижена до - 1% и меньше. Наилучшая разрешающая способность по времени, достигнутая при измерении данным методом ширины фронта ударной волны в металлах, составила 2 - 3 нс [148].

Ограничения во временном разрешении двухлучевого интерферометра, связанные с частотными характеристиками регистрирующей аппаратуры, снижаются при использовании скоростных фото-хронографов на базе электроннооптического преобразователя [192], [144]. В этом случае разрешающая способность метода может достигать субнаносекундного уровня, причем экспериментальные регистрограммы становятся гораздо более наглядными и легче обрабатываемыми. Кроме того, метод становится менее чувствительным к колебаниям коэффициента отражения контролируемой поверхности и, как следствие, интенсивности поступающего в прибор света. С другой стороны, эффективность использования светового потока выше в вариантах с применением фотоэлектронных умножителей.

В варианте ORVIS [144] двухлучевой интерферометр настраивается таким образом, что рекомбинирующие пучки наклонены друг относительно друга на некоторый

малый угол φ . В результате в поперечном сечении области интерференции образуется система полос, расстояние между которыми $d = \lambda / \sin \varphi$. При работе со светом, отраженным от движущейся поверхности, смещение полос на величину d соответствует одному интерференционному биению, то есть, как и ранее, изменению скорости поверхности на величину $\lambda/2 \cdot \Delta t$. Эволюция системы интерференционных полос в процессе измерений регистрируется электроннооптическим фотохронографом, работающим в режиме щелевой фоторазвертки. Из-за худших метрологических характеристик камер с ЭОП, их применение несколько увеличивает погрешность амплитудных измерений.

В обзоре [184] обсуждается лазерный измеритель скорости на базе интерферометра Фабри - Перо с регистрацией изменения положения интерференционных колец во времени при помощи высокоскоростного фотохронографа. Искомая скорость поверхности определяется по величине смещения интерференционных колец в фокальной плоскости выходной линзы интерферометра с использованием соотношений типа:

$$u(t) = \frac{c\lambda}{4h} \left[i(t) + \frac{d^2(t) - d_{L0}^2}{d_1^2 - d_0^2} \right],$$

где c - скорость света, λ - длина волны излучения, h - расстояние между зеркалами интерферометра Фабри - Перо, d_0, d_1 - исходные диаметры интерференционных колец нулевого и первого порядка интерференции, $d(t)$ - текущий диаметр рассматриваемого интерференционного кольца, d_{L0} - диаметр ближайшего интерференционного кольца исходного излучения, i - целое число возникнувших или исчезнувших колец. Расстояние h между зеркалами интерферометра Фабри - Перо определяет его чувствительность к изменению скорости отражающей поверхности. С другой стороны, для многолучевой интерференции нужны многократные отражения между зеркалами, а это требует времени. Анализ "времени заполнения" дает для 70% асимптотического значения интенсивности формулу:

$$\Delta t = \frac{2h}{c} \left(\frac{-1,81}{\ln R} \right) = \frac{\lambda}{2u_f} \left(\frac{-1,81}{\ln R} \right),$$

где $u_f = c\lambda/4h$, $R \approx 0,96$ - коэффициент отражения зеркал интерферометра Фабри - Перо. Согласно этому выражению для $u_f \sim 400$ м/с получаем время заполнения и, соответственно, временное разрешение методики около 30 нс.

Лазерные интерферометрические измерители скорости вещества в ударных волнах применяются как для фиксации скорости движения свободной поверхности тела, так и для измерений волновых профилей внутри прозрачной среды или на поверхности контакта между исследуемым образцом и "окном" из прозрачного материала. При этом следует учитывать влияние ударного сжатия прозрачной среды на ее оптические характеристики и закономерности отражений света в ней от движущейся поверхности.

В случае работы с прозрачными средами зондирующее излучение проходит через поверхность окна, затем через движущийся фронт ударной волны, за которым вещество имеет измененный показатель преломления, после этого оно отражается внутри ударно-сжатого вещества и выходит наружу через фронт ударной волны и неподвижную поверхность. Переход каждой границы сопровождается изменением скорости света и его длины волны. В простейшем приближении можно принять, что

разность длин оптического пути в веществе и вакууме при одной и той же геометрической длине пути пропорциональна интегральной плотности вещества в пределах этой длины пути, выраженной числом атомов на 1см^3 , независимо от сжатия вещества. Это приближение называют моделью Гладстона - Дейла. В этом случае величина Доплеровского сдвига длины волны излучения при его отражении в ударно-сжатой прозрачной среде в точности соответствует тому, которое имеет место при той же скорости в вакууме. Если же модель Гладстона - Дейла для выбранного оконного материала недостаточно точна, то в обработке интерферограмм должны быть учтены соответствующие поправки. В частности, основная расчетная формула для двухлучевого интерферометра принимает вид:

$$u(t) = \frac{\lambda N(t)}{2\Delta t(1 + \delta)(1 + \Delta\nu/\nu_0)},$$

где $\Delta\nu/\nu_0$ - частотная коррекция, связанная с влиянием сжатия на показатель преломления.

Интерферометр и регистрирующая аппаратура могут быть удалены от экспериментальной сборки на десятки метров. Применение волоконных световодов в качестве линий связи обеспечивает проведение измерений вне пределов прямой видимости объекта. Используются различные типы волоконно-оптических линий связи - с одним общим волокном для передачи излучения от лазера к мишени и обратно к интерферометру, с одним волокном для передачи излучения к объекту и вторым для передачи отраженного излучения, а также пучки из семи волокон, в которых центральное волокно служит для передачи излучения от лазера, а шесть остальных - для передачи отраженного излучения к системе регистрации. Так как между экспериментальной сборкой и регистрирующей аппаратурой нет электрической связи, лазерные методы обладают высокой электрической помехоустойчивостью.

2.2.5 Доплеровское измерение массовой скорости

Американские исследователи [197] предложили схему измерения массовой скорости в области высоких давлений, которая основана на смещении резонансов взаимодействия нейтронов с ядрами движущегося вещества по отношению к положению их у покоящихся ядер (доплеровский сдвиг). Для получения высоких давлений используется энергия деления ядер урана нейтронами, образующимися при ядерном взрыве.

К плоскому слою урана примыкает образец из исследуемого материала. Скорость фронта ударной волны определяется по времени появления световых вспышек

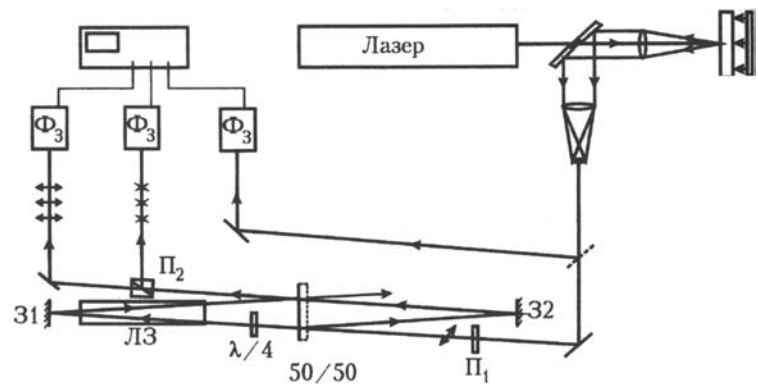


Рис. 2.10: Сравнение результатов абсолютных измерений [197] на ударной адиабате молибдена с расчетами 1 - интерполяция между данными [114] и [110], 2 - ТФПК

на контрольных поверхностях в образце. Для измерения массовой скорости используются нейтроны с энергией в диапазоне $10 - 10^3$ эВ, в котором обычно расположены резонансы. Представляют интерес вещества с ярко выраженными резонансами, что обеспечивает заметное ослабление потока нейтронов, проходящих через образец и регистрируемых в эксперименте. Если резонанс в образце наблюдается при энергии нейтронов ε_n (или при скорости нейтронов v_n) и при этом часть вещества образца движется в направлении регистрации со скоростью u , то дополнительно будет происходить ослабление потока нейтронов, скорость которых $v'_n = v_n + u$. В спектре потока нейтронов, прошедших образец, будет два минимума, обязанных выделенному резонансу. Экспериментальная задача состоит в регистрации спектра потока нейтронов. Если источник нейтронов можно считать мгновенным, то измерение спектра нейтронного потока осуществляется по времени пролета нейтронами известной базы L . При этом временное разрешение интересующих нас резонансов будет определяться разностью моментов прилета к датчику нейтронов со скоростями v_n и v'_n

$$t = \frac{L}{v_n} - \frac{L}{v'_n} = L \frac{u}{v_n^2 [1 + (u/v_n)]}.$$

Величина $u/v_n \ll 1$, так что $t \sim u$. Для интересующих нас интенсивностей ударных волн $u \geq 10$ км/с приемлемые для измерений величины $t \approx 1$ мкс получаются при пролетной базе

$$L(\text{см}) = 20\varepsilon_n(\text{эВ}) \frac{t(\text{мкс})}{u(\text{км/с})}, \quad v_n[\text{см/с}] = 1.4 \cdot 10^6 \varepsilon_n(\text{эВ}). \quad (2.5)$$

Для резонанса с энергией $\varepsilon_n = 10^3$ эВ подстановка значений $u = 10$ км/с и $t = 1$ мкс дает $L \approx 2$ м. Интересующие нас нейтроны пролетят такую базу за $t \approx 5 \cdot 10^3$ мкс. Длительность источника нейтронов по данным работы [197] составляет 0.5 - 0.8 мкс, так что применимость выбранного метода регистрации очевидна. Толщина образца выбирается такой, чтобы за время работы источника обеспечивалось вовлечение в движение значительной части образца.

Существенное значение для экспериментального обеспечения метода имеет величина спектрального потока нейтронов в резонансной области $\varepsilon_n = 10 - 10^3$ эВ. Количество таких нейтронов в делительном спектре весьма мало, для его увеличения между ураном и образцом в [197] помещался тонкий слой водородосодержащего вещества (оргстекла). Это позволяет повысить нейтронный поток на границе примерно на порядок.

Обсуждаемый способ измерения массовой скорости не является универсальным. Для исследуемых веществ сечения в резонансах должны обеспечивать хорошо регистрируемое ослабление нейтронного потока как неподвижными, так и движущимися веществами на толщинах, сопоставляемых с измерительными базами. Такими свойствами обладают молибден, железо, медь и др. Кроме того, имеются элементы, ядра которых обладают аномально большими резонансными сечениями (вольфрам, золото, кобальт). Размещение в образце тонких слоев из этих элементов также может быть использовано для измерения массовой скорости. Более того, в некоторых случаях энергетическое уширение отдельных резонансов может быть использовано для оценки температуры вещества перед и за фронтом ударной волны.

Наиболее ярко резонансы выражены у молибдена, который и исследовался в работе [197]. В уране было реализовано давление $p \approx 90$ Мбар, в молибдене зафиксиро-

рованы $D = 18.7 \text{ км/с}(\pm 5\%)$ и $u = 10.2 \text{ км/с}(\pm 5\%)$. Достигнутая в измерениях точность затрудняет использование полученной экспериментальной точки для калибровки уравнений состояния молибдена (рис. 2.10). Главные источники погрешности измерений связаны с неопределенностью длительности источника нейтронов и различными механизмами размывания резонансов. Однако вклад в погрешность многих из этих факторов ослабевает с увеличением массовой скорости, так что при $u \approx 100 \text{ км/с}$ имеется принципиальная возможность достижения точности $\Delta u/u \approx 1\%$. Это стимулирует дальнейшие работы по совершенствованию метода.

2.3 Методы измерения ударной сжимаемости

При использовании динамических методов для изучения свойств веществ наиболее естественными представляются измерения в исследуемом веществе двух кинематических величин: D и u . Однако осуществление этой возможности сталкивается со значительными трудностями. В первую очередь они связаны с извлечением данных о параметрах течения за фронтом. Принципиальная возможность получения таких данных существует, и она связана с использованием проникающих физических полей¹. Например, при малых амплитудах ударной волны, когда свойства исследуемых сред меняются не сильно, это осуществляется с помощью магнитоэлектрического метода измерения u в диэлектриках [1], [150].

При слабых амплитудах нагружения диэлектрик сохраняет свои магнитные свойства. Магнитное поле фактически не реагирует на прохождение фронта ударной волны и увлекается токопроводящей стороной витка, пришедшей в движение вместе с веществом. Это приводит к изменению напряженности магнитного поля. Превращение диэлектрика в проводник при повышении интенсивности волны приводит к замыканию внедренного витка поверхностью фронта, и соответствующее изменение магнитного поля несет информацию не о массовой скорости, а о волновой. Аналогичные возможности электромагнитного метода [74], в котором в исследуемый образец внедряется одна из пластин конденсатора и измеряется изменение напряженности электрического поля при последующем движении.

В области пониженных (≤ 100 кбар) давлений при изучении прочностных свойств материалов и кинетики возбуждения детонации в конденсированных ВВ с успехом применяются манганиновые датчики давления [150], [43], изменяющие свое электросопротивление с увеличением давления.

В этом же диапазоне относительно невысоких давлений квазиакустическое приближение позволяет рассчитать термодинамические параметры течения по скорости движения свободной поверхности образца после выхода на нее импульса сжатия. Для этой цели широкое распространение получили емкостные методы [74] и в последнее время методы лазерной интерферометрии [140], [30].

Более широкие возможности для получения информации за фронтом ударной волны открывает жесткое электромагнитное излучение. Так, рентгеновское просвечивание ударно-сжатого вещества [175], [63] позволяет определить плотность за фронтом или скорость перемещения внедренных в исследуемое вещество непрозрачных

¹В методе торможения измеряется не скорость вещества за фронтом u , а скорость подлета разгоняемой пластины к мишени, изготовленной из того же материала, что и ударник, при этом $u = w/2$ и задача вывода информации из области, находящейся в движении, фактически не решается [69].

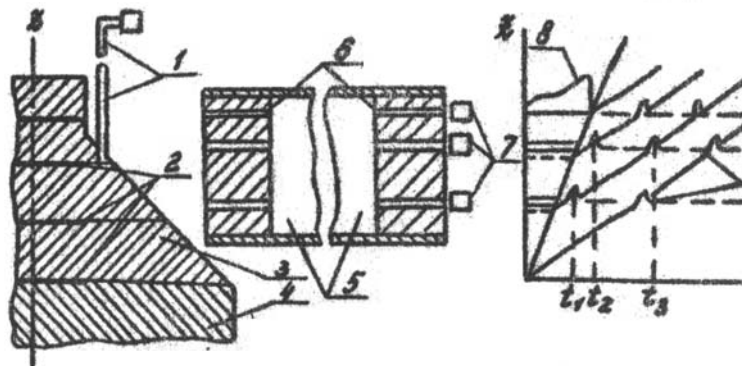


Рис. 2.11: Схема установки и эпюра регистрируемых сигналов: 1 - оптический канал, 2 - реперные слои, 3 - исследуемое вещество, 4 - канал формирования ударной волны, 5 - коллимирующие щели, 6 - коллиматор, 7 - детекторы гамма-излучения, 8 - сигнал излучения неподвижного репера, 9 - сигналы излучения движущихся реперов

реперных слоев, Однако эти методы в силу их недостаточной точности не получили широкого применения в исследованиях термодинамических свойств ударно-нагруженных веществ.

Интересными возможностями обладает метод рентгеновской дифрактометрии ударно-сжатого вещества [175], [63], позволяющий непосредственно фиксировать параметры кристаллической решетки и проследить кинетику перехода от одномерного к объемному сжатию вещества за фронтом ударной волны. В частности, в работе [176] показано, что фтористый литий при давлении ≈ 1.1 Мбар остается в твердом состоянии, это соответствует результатам оптических измерений кривой плавления [180].

Характерная особенность динамических методов состоит в том, что будучи основанными на измерении механических параметров и использовании общих законов сохранения [190] эти параметры дают уравнение состояния лишь в калорической форме $E = E(p, V)$, которое не является термодинамически полным, так как не содержит температуру или энтропию ударного сжатия. Эти величины при определенных условиях могут быть получены из $E = E(p, V)$ с привлечением первого закона термодинамики [144]. Поэтому вполне понятен тот большой интерес, который вызывают температурные измерения в динамических экспериментах. К сожалению, оптические методы фиксации температуры могут быть применены лишь для оптически прозрачных и изотропных сред, таких как ионные кристаллы [180], газовые и жидкие среды [68], [124].

Дальнейшее расширение возможностей динамических исследований связано с использованием нейтронного и гамма-излучения. Остановимся на них более подробно.

2.3.1 Метод гамма-репера

В работе [48] предложен способ одновременного измерения величин D и u с помощью гамма-активных реперных слоев, внедренных в исследуемое вещество. В процессе газодинамического движения реперные слои увлекаются движущимся веществом. С помощью системы коллимирующих щелей фиксируются моменты прохождения ими

контрольных положений.

В экспериментах наиболее просто реализуется "плоская" геометрия фронта ударной волны, реперных слоев и коллимирующих щелей, при которой плоскости соответствующих поверхностей параллельны друг другу (рис. 2.11). С этой целью по ходу волны устанавливается цилиндрический канал, изготовленный из вещества (магний, органика и др.), плотность которого меньше плотности материала, в котором размещена экспериментальная установка. Как следует из результатов двухмерных газодинамических расчетов, постройка такого канала обеспечивает достаточное опережение фронта ударной волны по отношению к фронту в окружающей среде, причем в нейтральной части цилиндра, диаметр которой составляет $\approx 2/3$ наружного, фронт волны будет плоским. Измерительный блок устанавливается на торце цилиндра. Защита коллимирующей системы, которая исключает ее повреждение до завершения регистрации моментов прохождения реперными слоями контрольных положений, осуществляется постановкой по ходу волны слоев плотного вещества (свинец, сталь).

Для измерения массовой скорости u достаточно зарегистрировать моменты прохождения одним реперным слоем плоскостей двух коллимирующих щелей, расстояние между которыми является базой. Тогда $u = a/(t_3 - t_1)$ (см. рис. 2.11). Постановка двух реперных слоев у двух коллимирующих щелей позволяет определить D по сопоставлению моментов начала их движения: $D = a/(t_2 - t_1)$. При этом ударное сжатие на фронте волны δ определяется только на основании измерений временных интервалов: $\delta = a(t_3 - t_1)/(t_3 - t_2)$. Обычно в экспериментальных установках количество реперных слоев и коллимирующих щелей превосходит указанный минимум. Это дает возможность получать информацию о нестационарности регистрируемого ударно-волнового явления, о протекании нейтронных и гамма-процессов.

В предложенной принципиально простой схеме основным элементом, позволяющим проводить временные измерения, является реперный слой. Его излучение должно проходить через периферийные слои исследуемого вещества, в которых газодинамическое движение значительно отличается от используемого "плоского" ударно-волнового течения. Поэтому в реперном слое должны быть источники жесткого гамма-излучения или быстрых нейтронов ($E_n > 1$ МэВ). Из-за нестационарности и высокой скорости процессов интенсивность излучения слоя должна обеспечивать возможность регистрации моментов пересечения им плоскостей коллимирующих щелей с помощью детекторов типа ФЭУ или ФЭК в аналоговом режиме.

Использование для этих целей стационарных источников излучения исключено. Даже при применении высокочувствительных детекторов типа ФЭУ (чувствительность $\alpha \sim 10^{-11}$ А · см²/квант) активность их должна составлять $\sim 10^7$ Ки. Для работы в условиях повышенных фонов более предпочтительными являются детекторы типа ФЭК ($\alpha \sim 10^{17}$ А · см² · с/квант). При этом необходимая активность источников существенно выше. Таких источников нет, но даже если бы они и были, работать с ними было бы невозможно, так как их энергетическая мощность будет $\sim 10^4$ МВт.

Целесообразно рассмотреть импульсные источники, которые могут существовать на выделенной стадии протекания используемого газодинамического процесса. В частности, интенсивный гамма-источник может быть получен при импульсном облучении нейтронами вещества, ядра которого обладают сечением радиационного захвата, в $\sim 10^3$ раз превосходящим соответствующие сечения исследуемого вещества. В существующих импульсных источниках обычно рождаются быстрые нейтроны

($E_n \sim 1$ МэВ). Реакции радиационного захвата эффективно идут при более низких E_n . Поэтому нейтронный импульс должен опережать регистрируемое газодинамическое движение на временной интервал, необходимый для замедления нейтронов в исследуемом веществе до оптимальных энергий. В ряде случаев в реперных слоях можно использовать европий, для которого при $E_n = 10 - 100$ эВ сечение (n, γ) - реакции составляет $\sigma = 220 - 80$ барн.

В применениях метода отражения в качестве эталонного вещества широко используется алюминий. В области 5 - 150 Мбар имеются существенные неоднозначности в уравнении состояния этого вещества. Это и обусловило интерес к алюминию в первых применениях нового метода. Возможны, конечно, и другие сочетания веществ репера и образца. В отдельных случаях можно использовать в реперных слоях импульсные нейтронные источники (конвертеры).

За времена замедления нейтронов диффузия и поглощение фактически не меняют их плотность. Поэтому можно оценить связь между необходимой интенсивностью гамма-репера Γ (с^{-1}), с одной стороны, потоком быстрых нейтронов Φ (см^{-2}) и массой репера M , с другой,

$$\Gamma \sim \frac{\Phi \sigma N v M}{l} \sim 0.2 \cdot 10^7 \Phi M. \quad (2.6)$$

Здесь σ - сечение (n, γ) - реакции на ядрах материала репера, N - количество этих ядер в единице массы репера, v - скорость замедляющихся нейтронов, l - пробег нейтронов внешнего потока в исследуемом веществе. Численное значение приведено для алюминия и материала репера-оксида европия Eu_2O_3 , спрессованного до плотности 2.7 г/см^3 . Поскольку для европия с замедлением нейтронов σ растет быстрее, чем v^{-1} , величина Γ будет возрастать до тех пор, пока не сравняются скорости поступления нейтронов в реперный слой из алюминия и поглощения их европием. При дальнейшем замедлении нейтронов величина Γ будет снижаться вследствие обеднения нейтронами областей алюминия, окружающих реперный слой. Если толщина слоя ~ 0.5 см, максимальная интенсивность излучения его достигается при $\sigma \sim 200$ б, что соответствует энергиям нейтронов $E - N \sim 10 - 100$ эВ. Характерное время замедления нейтронов до указанных E_n составляет 10-45 мкс.

Замедление нейтронов в образце приводит к нагреву исследуемого вещества, который в общем случае влияет на его ударную сжимаемость. Для простоты интерпретации результатов эксперимента необходимо, чтобы такое влияние было слабым. Это ограничивает сверху величину потока Φ . При исследовании алюминия приемлемые значения составляют $\Phi < 10^{17} \text{ см}^{-2}$. Ограничения потока снизу (2.6) связаны с необходимостью увеличения размеров измерительного блока.

Реперные слои представляют собой неоднородности в исследуемом материале, которые при интерпретации результатов эксперимента учитываются на основе газодинамических расчетов. Для уменьшения неопределенностей, связанных с внесением расчетных поправок, необходимо, чтобы толщина реперного слоя не превосходила 10% от величины измерительной базы. Применяемая в опытах аппаратура позволяет получать приемлемую точность регистрации временных интервалов ($\Delta t/t \approx 1\%$) при их длительности ≈ 2 мкс. Поэтому для изучения ударной сжимаемости алюминия при давлении ~ 10 Мбар ($D \sim 25$ км/с) база выбирается ~ 5 см, а толщина реперного слоя $\Delta \leq 0.5$ см.

Измерительный блок (см.рис. 2.11) выполнялся в виде набора плит, изготовленных из алюминия марки АД-1 ($99\% \text{ Al}$, $\rho_0 = 2.7 \text{ г/см}^3$), в которые реперные слои введ-

рялись в виде таблеток. Такая форма слоя согласуется с цилиндрической геометрией канала формирования ударной волны и позволяет при необходимости размещать дополнительные коллимирующие системы. Для обеспечения максимальных потоков регистрируемого излучения в направлении детекторов толщина исследуемого вещества должна быть минимальной, не искажающей движение фронта и вещества за ним в области размещения реперов. Поэтому боковая поверхность блока со стороны коллимирующей системы выполнялась в виде плоскости, ориентированной под углом 45° к направлению движения фронта. Контроль формы осуществлялся с помощью трех оптических каналов, размещенных в углах равностороннего треугольника на диаметре 150 мм (на рис. 2.11 показан один канал). Фиксировались моменты возникновения вспышек света при выходе ударной волны на выделенную контрольную поверхность, перпендикулярную оси блока.

Процесс измерений осложняется значительными фоновыми явлениями. Основными источниками фонов являются нейтроны первичного потока, а также гамма-кванты, рожденные при (n, γ) - реакциях в образце, в элементах конструкции экспериментальной установки и в окружающей среде. Защита от нейтронов достигается удалением детекторов от исследуемого вещества. Защита от захватного гамма-излучения обеспечивается коллимирующей системой. Свинцовые перегородки ее фактически полностью ослабляют гамма-поток, выходящий из измерительного блока и его окружения. Неослабленным остается только излучение, проходящее через коллимирующие щели. При применении детекторов типа ФЭК достаточна длина коллимирующей системы $L \sim 2$ м. Ток детектора связан с интенсивностью излучения реперного слоя Γ соотношением

$$I \approx \Gamma \frac{\alpha \exp(-\mu \rho d)}{4\pi L^2}, \quad (2.7)$$

где α - чувствительность детектора, μ - массовый коэффициент ослабления гамма-излучения алюминием, ρ - плотность сжатого алюминия, d - его толщина. Для обеспечения $I \sim 1$ А при $\rho \sim 10$ г/см³, $d \sim 10$ см, $L \sim$ м необходимо значение $\Gamma \sim 10^{24}$ с⁻¹. В этом случае, согласно (2.6), при потоках $\Phi \sim 10^{16}$ см⁻² масса излучающей в сторону детектора части реперного слоя должна составлять 10 г. За фронтом ударной волны вещество репера сжимается примерно в три раза. При этом гамма-кванты в направлении детектора эффективно выходят из глубины материала репера 2–3 см. В опытах применялись реперные таблетки диаметром ~ 9 см и толщиной ~ 0.4 см. Коллимирующая система выполнялась в виде набора соосных жестко соединенных между собой свинцовых дисков, в которых имелись щели сечением 3×90 мм. Ширина щели определяется характерной толщиной, сжатой в ударной волне реперной таблетки (1 мм) и возможностями юстировки коллимирующей системы. Расстояние между плоскостями щелей являются измерительными базами. Погрешность определения величин этих баз обусловлена неточностью изготовления системы, а также непараллельностью плоскостей щели, реперного слоя и поверхности фронта ударной волны. Плоскости щелей устанавливались параллельно плоскостям реперных слоев с точностью $\pm 0.2^\circ$. Связанная с этой непараллельностью погрешность в определении базы пренебрежимо мала по сравнению с неточностью изготовления системы, которая на базе 50 мм составляет $\sim 2\%$. Контроль формы фронта ударной волны позволяет при необходимости учитывать поправку к размеру базы, связанную с непараллельностью плоскостей фронта и реперных слоев. С целью уменьшения гамма-фона, регистриру-

№ опы- та	ρ , г/см ³	D , км/с	u , км/с	p , Мбар	$\delta = \rho/\rho_0$
1	2.55 ± 0.03	24.8 ± 0.5	15.7 ± 0.3	9.9 ± 0.3	2.73 ± 0.08
	2.71	24.2 ± 0.7	15.1 ± 0.4	9.9 ± 0.3	2.65 ± 0.1
2	2.58 ± 0.03	24.0 ± 0.4	15.1 ± 0.2	9.3 ± 0.2	2.70 ± 0.05
	2.71	23.4 ± 0.6	14.5 ± 0.3	9.3 ± 0.2	2.63 ± 0.07
3	2.71	40 ± 5	30 ± 2	32 ± 2	3.9 ± 1.2

Таблица 2.2: Результаты абсолютных измерений в алюминии

емого детекторами до прихода ударной волны, для определения D второй и третий реперные слои (нумерация реперных слоев и коллимирующих щелей по ходу волны) были заглублены относительно плоскостей соответствующих щелей на расстояние 1 мм (см.рис. 2.11). Четвертый реперный слой располагается по центру щели, что позволило получить экспериментальную информацию о протекании нейтронных и гамма-процессов. Внедрение интенсивных источников в образец приводит к нагреву вещества излучением. К моменту прихода ударной волны происходят перемещение границы алюминий-репер и изменение состояния веществ образца и реперного слоя. Это оказывает заметное влияние на интерпретацию экспериментальных результатов, поэтому соответствующие процессы следует учитывать с помощью газодинамических расчетов. При обработке осциллограмм широко применялись математические программы, позволившие учесть затухание сигнала при передаче его по кабелю, особенности регистрируемых сигналов, возможные нелинейность развертки и дисторсию изображения. С помощью экспериментальных установок, созданных в соответствии с изложенными принципами, было проведено три опыта по изучению ударной сжимаемости алюминия. Эти установки отличались в некоторых деталях (количество реперных слоев и коллимирующих щелей, размеры узлов и др.). Результаты измерений с учетом последних методических достижений при обработке осциллограмм, нестационарности движений и реперных слоев приведены в [113]. Здесь мы ограничимся сводной таблицей (табл.2.3.1). Напомним, что интенсивное гамма-излучение реперных слоев приводит к увеличению внутренней энергии алюминия до значений ≈ 1.5 кДж/г. Возникающее при этом давление приводит к уменьшению плотности алюминия до ≈ 2.55 г/см³ и сжатию пористого материала репера до плотности ≈ 6 г/см³, т.е. волна входит в образец, характеризующийся начальным состоянием $\rho_0 \approx 2.55$ г/см³, $E_0 = 1.5$ кДж/г. Экспериментальные точки на ударной адиабате, исходящей из такого начального состояния, приведены в строках 1, 3 табл.2.3.1. В строках 2 и 4 табл. 2.3.1 приведены результаты пересчета к ударной адиабате с $\rho_0 = 2.71$ г/см³, $E_0 = 0$, осуществленного при постоянном давлении. Выполненный пересчет слабо зависит от модельных соображений. Измерения в третьем опыте проведены вблизи нижней по давлению границы проявления оболочечных эффектов. К сожалению, отсутствие осциллограмм с короткой разверткой привело к большим погрешностям в экспериментальных результатах, и они не могут использоваться для калибровки теории. Опыт применений реперного метода измерений ударной сжимаемости показывает, что имеются большие возможности совершенствования его как при использовании различных сочетаний репера и исследуемого материала, так и при различной организации экспериментов.

Глава 3

Методы генерации неидеальной плазмы

В этой главе будут рассмотрены способы возбуждения и регистрации импульсов ударной нагрузки в конденсированных средах, используемые для получения информации о сжимаемости вещества, его механических и кинетических свойствах. Активные исследования в области физики ударных волн были начаты во время второй мировой войны с целью получения термодинамических уравнений состояния конденсированных сред в широком диапазоне давлений и температур. Для проведения необходимых измерений ударной сжимаемости веществ в этот период были созданы взрывные генераторы плоских ударных волн, разработаны дискретные методы измерения скорости ударных волн и скорости движения поверхности образца. Логика дальнейшего развития экспериментальной техники привела к разработке способов непрерывной регистрации давления и массовой скорости в полных импульсах ударной нагрузки, что открыло новые возможности для исследований механических и кинетических свойств различных материалов и химически активных веществ в условиях ударно-волнового нагружения. Радикальное улучшение пространственного и временного разрешения современных методов измерений сделало возможным исследование экстремальных состояний в лабораторных условиях с применением перспективных генераторов интенсивной импульсной нагрузки, таких, как лазеры, релятивистские электронные и ионные пучки.

Хотя техника ударно-волновых экспериментов неоднократно описана не только в оригинальных работах, но также и в известных обзорах [1], [162], [186], [17] и монографиях [69], [79], мы сочли целесообразным представить здесь методическую главу с тем, чтобы читатель мог непосредственно оценить доступность и достоверность обсуждаемых ниже физических результатов. При этом мы стремились описать хотя бы кратко, наиболее распространенные, а также перспективные способы возбуждения и регистрации динамических нагрузок в конденсированных веществах.

3.1 Взрывные генераторы динамических давлений

Простейшим способом возбуждения в твердом теле ударной волны с амплитудой в несколько десятков гигапаскалей является подрыв на поверхности образца заряда химического взрывчатого вещества (ВВ). Для простоты интерпретации результатов

измерений желательнее иметь в образце плоскую стационарную ударную волну. Плоские ударные и детонационные волны формируются с помощью различных плоско-волновых генераторов.

Чаще всего в качестве плосковолнового генератора используются конические взрывные линзы (рис. 3.1), принцип действия которых основан на использовании элементов с различной скоростью детонации или ударной волны. Подобные взрывные линзы состоят из наружного конического заряда ВВ с высокой скоростью детонации и вкладыша из ВВ с низкой скоростью детонации (обычно - смесь бариевой селитры с тротилом - баратол) или инертного материала (обычно - свинец или парафин). Высокоскоростная детонация в наружном конусе возбуждает во вкладыше детонационную или ударную волну, наклоненную к образующей конуса под некоторым углом φ , определяемым соотношением волновых скоростей в наружном и внутреннем элементах: $\sin \varphi = D_{\text{вкл.}}/D_{\text{кон.}}$. Угол раствора конуса ψ выбирается таким, чтобы на основании вкладыша выходила плоская волна: $\psi = \pi - 2\varphi$.

Помимо взрывных линз применяются также плосковолновые генераторы, использующие боковое метание пластины скользящей вдоль нее детонацией в слое ВВ. В процессе метания пластина разворачивается на определенный угол, величина которого в случае установившегося процесса не изменяется с расстоянием. Устройство заранее устанавливается с наклоном под обратным углом к поверхности инициируемого заряда ВВ с тем, чтобы соударение происходило одновременно по всей плоскости.

В детонационной волне непосредственно за ударным скачком начинается спад давления вследствие разлета продуктов взрыва. Для стационарности ударно-волнового процесса необходимо сформировать область постоянных параметров за ударным скачком. Импульсы ударной нагрузки с постоянным, в течение некоторого времени, давлением за ударным скачком генерируются ударом пластины. Достаточно большие поперечные размеры ударника и образца обеспечивают одномерность движения среды в течение промежутка времени, необходимого для измерений. Одномерность процесса нарушается волнами разгрузки, распространяющимися от боковых поверхностей ударника и образца (рис. 3.2 г). Чем большее требуемое время регистрации, тем больше должен быть диаметр плоской части ударника.

В момент соударения в ударнике и образце возбуждаются ударные волны, расходящиеся от поверхности соударения. Параметры ударной волны в образце определяются из условия равенства давлений и массовых скоростей по обе стороны от поверхности соударения и их соответствия ударным адиабатам ударника и образца. Искомые параметры соответствуют точке пересечения в координатах p , и ударной адиабаты материала образца и ударной адиабаты торможения материала ударника, имеющего первоначальную скорость W (рис. 3.2б). На тыльной поверхности ударника происходит отражение ударной волны. Появляется волна разрежения, распространяющаяся по образцу со скоростью звука (рис. 3.2в). Таким образом, в течение

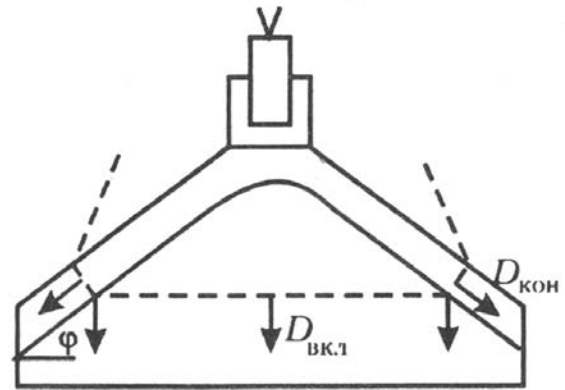


Рис. 3.1: Принцип действия конической взрывной линзы

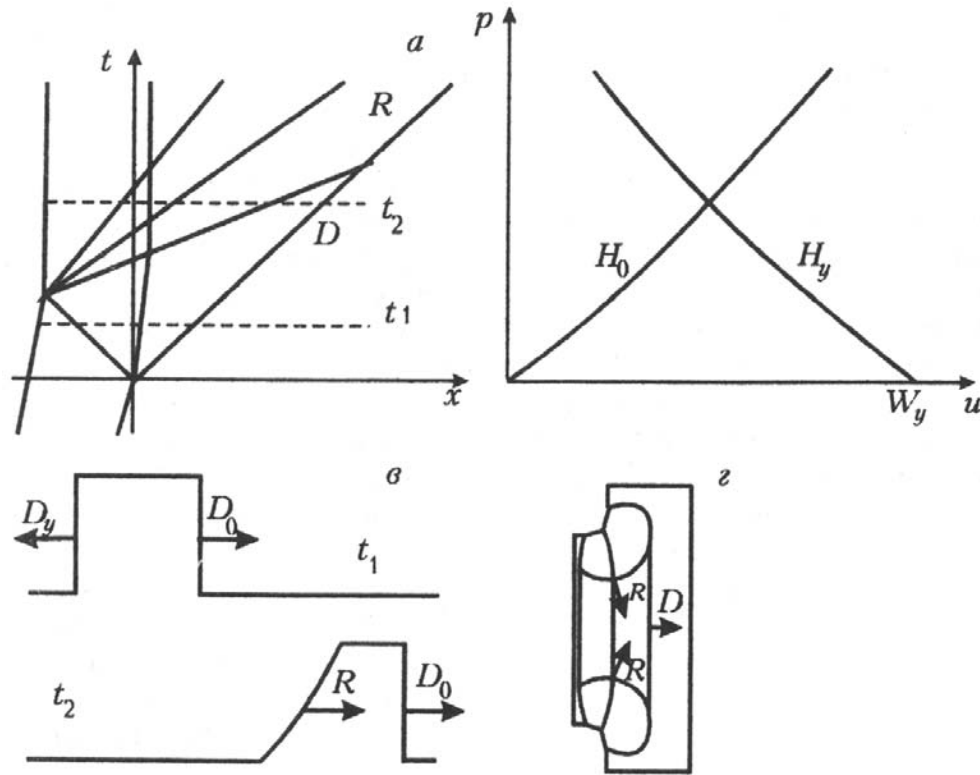


Рис. 3.2: Возбуждение импульса сжатия при соударении пластин.

времени циркуляции волн в ударнике на поверхности соударения поддерживается постоянное давление.

Метание ударников осуществляется детонацией зарядов взрывчатого вещества, с помощью пороховых или пневматических пушек или других устройств.

На рис. 3.3 приведена типичная схема взрывных метательных устройств [1], [162], [186], [17], [69], [79], [82], широко используемых в экспериментальной физике высоких динамических давлений. Подобные устройства дают возможность разгонять металлические или пласт-массовые ударники толщиной 1 - 10 мм до скоростей порядка - 6 км/с. Ударник сохраняет плоскую форму в центральной части смотря на то, что из-за радиального разлета продуктов взрыва давление на периферии заряда падает быстрее, чем у его оси. Коррекция импульса давления, действующего на край ударника достигается использованием фокусирующего кольца, которое вызывает подъем давления на периферии заряда при отражении детонационной волны и дополнитель-

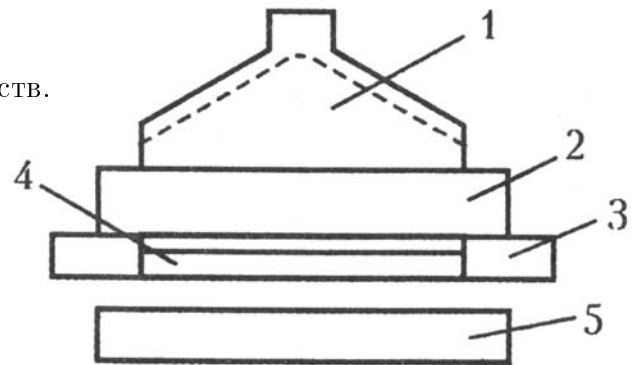


Рис. 3.3: Схема устройства для метания взрывом плоских ударников. 1 - плосковолновой генератор (взрывная линза), 2- заряд взрывчатого вещества, 3 - фокусирующее кольцо, 4 - метаемый ударник, 5 - мишень (образец)

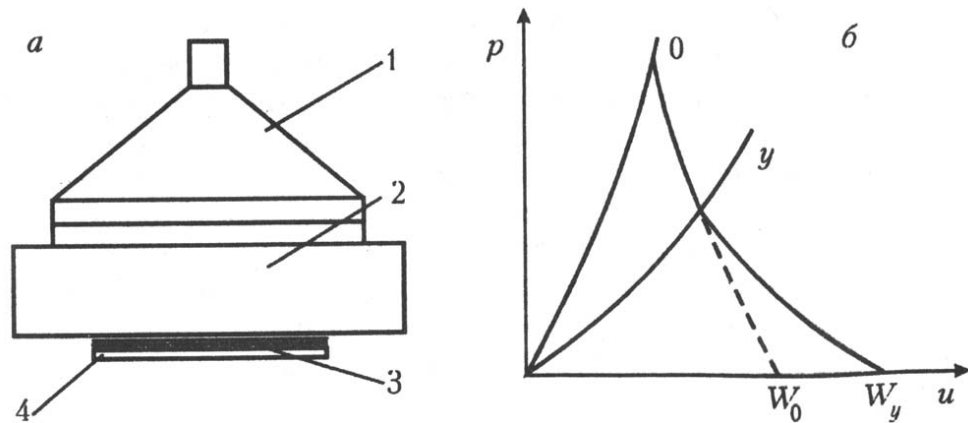


Рис. 3.5: Низкоскоростное метание плоских пластин ударной волной, а) - Схема взрывного устройства: 1- взрывная линза, 2 - толстая пластина - ослабитель, 3 - "амортизирующая" прокладка из материала с малым динамическим импедансом, 4 - метаемая пластина-ударник. б) - Диаграмма волновых взаимодействий: 0, У - ударные адиабаты материала пластины - ослабителя и ударника, W_0, W_y - скорости поверхностей пластины - ослабителя и ударника.

ное натекание продуктов взрыва в полость над ударником. Полость служит также для "смягчения" процесса нагружения ударника и предотвращения его откольного разрушения. При сохранении непосредственного контакта между ударником и продуктами взрыва трудно получить скорость метания ниже 1 км/с. Для снижения скорости используются пластины - ослабители из материала с более высоким, чем у ударника, динамическим импедансом. Схема такого устройства и диаграмма волновых взаимодействий приведены на рис. 3.5. Взрывная линза создает в пластине - ослабителе ударную волну с параметрами, соответствующими на p, u -диаграмме точке "0". Из-за различия динамических жесткостей материалов ослабителя и ударника последний при выходе ударной волны на его тыльную поверхность приобретает скорость более высокую, чем ослабитель. В результате ударник отделяется от ослабителя.

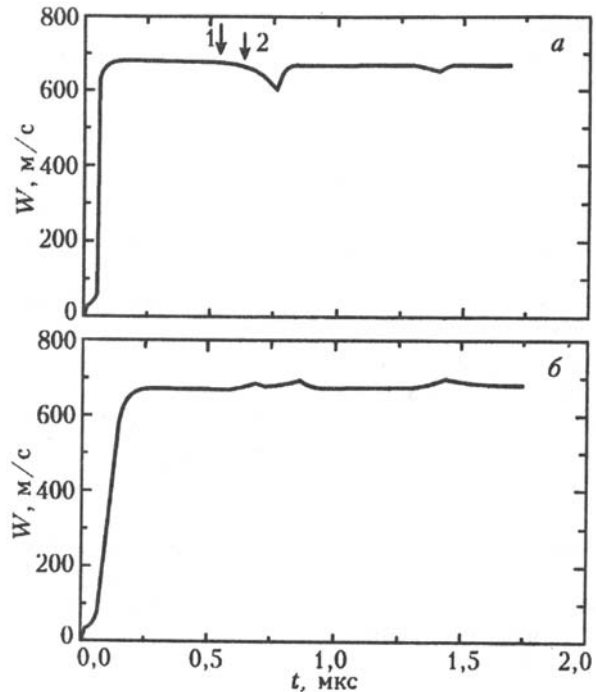


Рис. 3.4: Профили скорости свободной поверхности алюминиевого ударника толщиной 2 мм при его метании ударной волной. а) - ударник установлен в непосредственном контакте с медной пластиной ослабителем, б) - между ударником и ослабителем размещена полиэтиленовая прокладка 0.6 мм толщиной.

На рис. 3.4 а) приведен профиль скорости свободной поверхности алюминиевого ударника толщиной 2 мм, находящегося в контакте с медной пластиной - ослабителем. На приведенном профиле виден отрицательный пучок скорости, причиной появления которого является переотражение волны разгрузки на поверхности контакта с пластиной - ослабителем. Отражение на границе с более жесткой средой происходит с сохранением знака нагрузки, поэтому в разгруженном ударнике образуется волна растяжения, распространяющаяся к его тыльной поверхности. На контактной поверхности отсутствует сопротивление растяжению, поэтому процесс отражения волны разгрузки у этой поверхности завершается возвратом давления к нулю. В результате образуется короткий импульс растяжения, который и дает отрицательный выброс на профиле скорости свободной поверхности ударника. Если интенсивность ударного сжатия достаточно велика, вблизи контактной поверхности возможно разрушение метаемого ударника.

На рис. 3.4 б) представлены результаты измерений в несколько измененной постановке. Между ударником и ослабителем в этом случае была проложена полиэтиленовая пленка толщиной 0.2 мм. Введение амортизирующей прокладки из материала с малым динамическим импедансом привело к изменению режима отражения волны разгрузки, тем самым предотвращая откольное разрушение ударника. Устройства, показанные на рис. 3.5, привлекательны также тем, что могут быть использованы для метания весьма тонких ударников - фольг или пленок, чем обеспечивается получение коротких импульсов ударной нагрузки.

В рамках выбранной конструкции скорости метания ударников варьируются изменением типа используемого взрывчатого вещества, его плотности, а также материала и толщины ударника. Предельной скоростью метания является, очевидно, скорость истечения продуктов взрыва с торца заряда ВВ, которая примерно равна скорости детонации [29]. Хотя для наиболее мощных современных ВВ эта величина составляет примерно 8км/с, реально такие скорости метания непосредственно продуктами взрыва при разумных размерах зарядов недостижимы. В случае толстых ударников этому препятствует ограниченность времени действия давления продуктов взрыва. Очень тонкие ударники в процессе разгона теряют устойчивость, их плоскостность нарушается.

3.2 Баллистические установки

Взрывные генераторы ударных волн компактны, дешевы и обеспечивают широкий диапазон амплитуд и длительностей импульсов нагрузки. Однако, разрушающее действие взрыва накладывает специфические требования безопасности. Для работы с такими устройствами необходимы специальные дорогостоящие взрывные камеры или полигоны, а также технологическое оборудование для дистанционного изготовления высококачественных профилированных зарядов. Альтернативным решением является использование гладкоствольных баллистических установок. Бесспорным преимуществом таких установок является возможность плавной регулировки скорости соударения, обеспечение минимального и контролируемого в каждом опыте перекоса ударника относительно плоскости образца, высокая однородность области одномерного течения за фронтом Ударной волны в образце. Для измерений ударной сжимаемости важно также, что ударник в процессе разгона практически не претерпевает

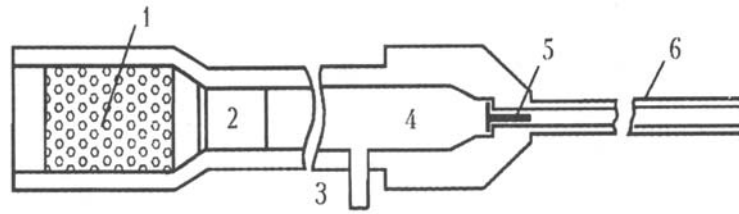


Рис. 3.6: Схема двухступенчатой баллистической установки: 1 - пороховой заряд, 2 - поршень, 3 - отверстие для впуска легкого газа, 4 - газовая камера, 5 - снаряд, 6 - ствол.

разогрева, как это имеет место в случае использования взрывных устройств.

Для исследований механических свойств материалов при ударно-волновом нагружении обычно используют пневматические пушки с калибром 50-150 мм [155], [116], [193]. При длине ствола до 14 м и начальном давлении сжатого газа (азот или гелий) до 150 атм на таких установках получают скорости метания в диапазоне от 100 до 1500 м/с. Плоский ударник устанавливается на торец пустотелого цилиндрического снаряда. Для достижения наибольшей параллельности соударяющихся плоскостей мишень размещают таким образом, что соударение происходит в момент, когда снаряд еще не полностью вышел из ствола. Метод допускает установку образца и датчиков как на мишени, так и на самом снаряде.

Скорости метания пороховых пушек составляют 400 - 2500 м/с. Из баллистики известно, что скорость снаряда определяется формулой [72]:

$$w = c_g \sqrt{\frac{2f}{[\kappa(\kappa - 1)(m_p/m_g + b_1)]}}$$

где c_g - скорость звука в газе, толкающем снаряд, f - термический коэффициент полезного действия в процессе расширения газа, κ - показатель адиабаты газа, m_p - масса снаряда, m_g - масса газа, b_1 - константа (коэффициент пропорциональности между скоростью снаряда и средней скоростью газа). Это соотношение показывает, что скорость метания ограничена величиной, пропорциональной скорости звука в толкающем газе и практически не превышает значения:

$$w_1 \approx (1.8 \dots 2.5), \quad c_g = (1.8 \dots 2.5) \sqrt{\kappa \frac{R_g T}{\mu}}$$

Следовательно, чтобы увеличить скорость метания, нужно увеличить температуру толкающего газа T и уменьшить его молекулярный вес μ .

Наибольшие скорости метания достигаются в многоступенчатых легкогазовых установках [72]. Задачей дополнительных ступеней является подогрев и сжатие легкого толкающего газа. На рис. 3.6 приведена схема двухступенчатой установки. В камере 4 находится легкий газ, сжатие и адиабатический разогрев которого производится поршнем 2, приводимым в движение пороховыми газами. После того, как давление в легкогазовой камере достигнет заданной величины, начинается движение снаряда 5. Начальное давление легкого газа составляет обычно 10-100 атм, а в момент выстрела оно может достигать 10000 атм.

Максимальная скорость метания, полученная на двухступенчатой легкогазовой установке, составляет 11.2 км/с при массе снаряда 0.04 г и калибре 5.6 мм [72]. Для

экспериментов с плоскими ударными волнами применяются двухступенчатые легкогазовые установки с калибром ствола 12-25 мм и длиной до 25 м, на которых получены скорости метания до 8 км/с [177], [183].

Баллистические установки, предназначенные для ударно-волновых измерений, обычно оснащаются системой датчиков для измерений скорости и относительного перекоса снаряда в каждом опыте, точной синхронизации измерительной аппаратуры и определения возможного искривления поверхности ударника в процессе разгона. Ствол перед снарядом и пространство вокруг образца вакуумируются. В целом двухступенчатая баллистическая установка представляет собой довольно сложное и дорогое сооружение с длительным циклом подготовки и проведения опыта и восстановления готовности к последующей работе.

3.3 Перспективные источники высоких динамических давлений

Взрывные и баллистические генераторы плоских ударных волн являются сейчас основными инструментами в физике высоких динамических давлений. Стремление к дальнейшему продвижению в область недоступных ранее параметров и организации ударно-волновых исследований в условиях обычной физической лаборатории побуждает к использованию новых, нетрадиционных способов интенсивного динамического воздействия на вещество. В качестве перспективных источников высоких динамических давлений предлагается использовать электровзрывные устройства, импульсные лазеры большой мощности и сильноточные ускорители электронов и ионов.

Электрический взрыв проводников, возникающий при разряде на них конденсаторной батареи, используется для метания тонких пластин в экспериментах с ударными волнами [174], [157], [191]. В последнем случае образующаяся в результате электровзрыва плотная плазма плоского проводника (фольги) толкает поршень из диэлектрического материала, на котором может быть размещен дополнительный тонкий Ударник из материала с высоким динамическим импедансом. варьированием напряжения и емкости конденсаторной батареи, Размеров взрывающейся фольги удается изменять удельную энергию электровзрыва в широких пределах и тем самым варьировать скорости метания тонких ударников от 10-100 м/с до 18 км/с [22] и более. Электрический взрыв фольг используется для исследований динамической прочности материалов и определения их ударной сжимаемости в широком диапазоне параметров. Основной проблемой в применении данного метода является развитие неустойчивостей в процессе электровзрыва и последующего разгона тонкого ударника [157].

Высокая концентрация энергии достигается при фокусировке излучения мощных импульсных лазеров на малые, порядка 10^{-2} см², поверхности [22]. Под действием интенсивного излучения поверхностный слой образца испаряется, а возникающий "импульс отдачи" генерирует в мишени ударную волну. Гидродинамические расчеты ударных волн, возникающих под действием существующих лазерных систем, а также систем, проектируемых для задач управляемого термоядерного синтеза [212] показывают, что в этом случае имеется реальная возможность продвинуться в ультрамегабарный диапазон давлений. Высокие динамические давления создаются импульсами излучения с наносекундной и субнаносекундной длительностью, поэтому

все измерения необходимо проводить в мишенях, имеющих толщину несколько десятков микрон. С точки зрения исследований механических свойств материалов преимущество лазерных воздействий является возможность измерений сопротивления разрушению при кратчайших длительностях ударной нагрузки [192].

Созданные для целей управляемого термоядерного синтеза и решения прикладных задач мощные ($\sim 10^{14}$ Вт) импульсные генераторы релятивистских электронов и ионов [23], [211] позволяют фокусировать в мишенях интенсивные корпускулярные пучки на площади диаметром в несколько миллиметров. Вкладываемые таким образом удельные мощности $\sim 10^{10} - 10^{18}$ Вт/см² вызывают быстрый разогрев приповерхностных слоев мишени. Характерная глубина поглощения электронов с энергией порядка МэВ в металлах составляет 0,1 - 1 мм. При достаточно быстром воздействии рост температуры происходит в условиях постоянного объема и сопровождается ростом давления, что порождает волны сжатия в мишени.

3.4 Неидеальная плазма в ударных волнах

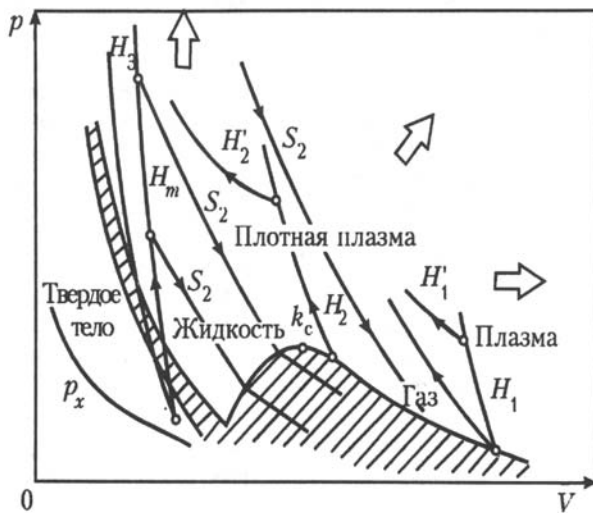


Рис. 3.7: Схема, поясняющая принципы динамической генерации плазмы: p_x - граница максимальных сжатий вещества - кривая "холодного" сжатия ($T = 0$ К), K_c - критическая точка, кружки - исходные состояния среды, H_1, H_2 - кривые сжатия цезия и инертных газов падающими и отраженными (H'_1, H'_2) ударными волнами, H_3, H_m - сжатие сплошных и пористых металлов ударными волнами, S_1 - кривая адиабатического сжатия цезия, S_2 - адиабаты разгрузки ударно-сжатых металлов. Двухфазные области при плавлении и испарении заштрихованы.

тальных данных для различных фазовых состояний.

Наименее изученные плазменные состояния с высокой плотностью достигаются в результате ударно-волнового воздействия на вещество, находящееся первоначаль-

В мощных ударных волнах происходят интенсивные сжатие и нагрев вещества и тем самым создается уникальная возможность исследования его фундаментальных свойств в экстремальных условиях. Сжимаемость среды под действием давления и зависимость ее плотности от температуры или энергосодержания описываются уравнениями состояния. Уравнение состояния выражает индивидуальные свойства вещества и необходимо для любых расчетов высокоэнергетических процессов в сплошной среде. По этой причине проблема широкодиапазонных уравнений состояния явилась стимулом для становления и развития физики ударных волн и до сего времени остается одним из основных направлений исследований. При решении многих современных задач возникает необходимость рассчитывать состояния вещества, находящегося в разных своих точках как в конденсированной, так и в газовой фазах одновременно. Возникает необходимость объединения теоретических представлений и эксперимен-

но либо в конденсированной, либо в газовой фазе. Высокая чистота и однородность исследуемого объема, отсутствие электрических и магнитных полей, затрудняющих диагностику и вызывающих развитие разнообразных неустойчивостей в плазме, высокая надежность и воспроизводимость результатов делают динамические методы удобным способом получения и исследования физических свойств сильнонеидеальной плазмы [69], [68]. Применение этих методов дало возможность существенно продвинуться по шкале плазменных давлений и температур и сделало объектом лабораторных исследований состояния с чрезвычайно высокими концентрациями энергии.

Условия сильной неидеальности реализуются при высоких концентрациях энергии в плазме. Как показывает $p - V$ диаграмма на рис. 3.7, неидеальная плазма занимает чрезвычайно широкую область состояний, непосредственно примыкая и фактически вторгаясь [68], [29] в область конденсированной фазы. Плазменная неидеальность оказывается существенной в весьма разнообразных природных явлениях и технических устройствах. Это плазма электронов в твердых и жидких металлах, полупроводниках и электролитах, сверхплотная плазма звездного вещества, глубинных слоев планет-гигантов Солнечной системы и других космофизических объектов. Неидеальная плазма возникает при ядерных взрывах, при взрывном испарении лайнеров пинчей и магнитокумулятивных генераторов, при воздействии мощных ударных волн, лазерного излучения, электронных и ионных пучков на конденсированное вещество и во многих других случаях. Очевидно, что сведения о свойствах плазмы чрезвычайно важны для физического анализа и расчета гидродинамических последствий такого рода воздействий. Необходимо уметь описывать состояния вещества в обширной области фазовой диаграммы: от сильносжатого конденсированного состояния до идеального вырожденного и бальцмановского газов, включая кривую кипения и окрестность критической точки.

Физическое описание плазменных состояний с высокой плотностью вещества крайне затруднено, так как определяется конкретными электронными спектрами атомов и молекул. Поэтому приоритет здесь принадлежит экспериментальным методам. Большинство элементов в нормальном состоянии являются металлами, поэтому и теплофизические исследования проводятся главным образом с металлами. Современная техника высокотемпературных измерений в статических условиях обеспечивает возможность измерений при давлениях до ~ 0.4 ГПа и температурах до $\sim 5 \cdot 10^3$ К [209], что соответствует кривой кипения и окрестности критической точки таких легкокипящих металлов, как *Hg*, *Cs*, *Rb*. Для других металлов эти состояния недоступны для традиционной экспериментальной техники и исследуются динамическими методами. Имеющиеся возможности для импульсной генерации плазмы представлены в табл.3.4, где приведены характерные (не обязательно максимальные) параметры источников энергии, применяемых для сжатия и разогрева вещества.

Для построения широкодиапазонных уравнений состояния привлекаются результаты экспериментов с ударными волнами, где исследуются как свойства ударно-сжатого сжатого вещества, так и его изоэнтропическое расширение из ударно-сжатого состояния. Эксперименты такого рода проводятся с образцами испытуемого вещества, находящегося как в конденсированной, так и в газовой фазе. Диапазон достижимых состояний расширяется также проведением экспериментов с пористыми твердотельными образцами [69].

Регистрируя состояния однократно и двукратно сжатых газов, в экспериментах с ударными волнами удается получить плазму сверхкритических параметров в

Первичный источник энергии	Конечная форма	Плотность энергии, МДж/см ³	Температура, эВ	Давление, 10 ⁵ Па	Полная энергия, МДж	Длительность, с	Мощность, Вт
Химические ВВ	-	10 ⁻²	0.5	5 · 10 ⁵	10 ²	10 ⁻⁷	10 ¹⁰
	Металл.	0.3	60	10 ⁷	3	10 ⁻⁶	10 ¹²
	пластины						
	Магнит. поле 1МЭ	4 · 10 ⁻³	0.3	5 · 10 ⁴	5	10 ⁻⁶	5 · 10 ¹²
	Магнит. поле 25МЭ	2.5	200	2.5 · 10 ⁷	1	10 ⁻⁷	10 ¹³
Ядерные ВВ	Взрывные генераторы плазмы	10 ⁻²	60	10 ⁵	30	10 ⁻⁶	10 ¹²
	-	10 ⁴	10 ⁷	10 ¹⁰	10 ¹¹	10 ⁻⁶	10 ²²
	Нейтрон. нагрев	10	50	2 · 10 ⁷	10 ³	10 ⁻⁶	10 ¹⁵
	Уд. волны в тв. теле	5	50	5 · 10 ⁷	10 ⁴	3 · 10 ⁻⁶	10 ¹⁵
	Уд. волны в газе	0.3	40	2 · 10 ⁵	10 ⁷	10 ⁻⁵	10 ¹⁸
Сжатый газ	Адиабат. сжатие	2 · 10 ⁻⁵	0.3	150	10 ³	6 · 10 ⁻³	10 ⁵
	Уд. трубы пневмат.	10 ⁻⁴	1	250	10 ⁻²	10 ⁻⁴	3 · 10 ⁸
	Уд. трубы на горении	10 ⁻⁶	2	10	2 · 10 ⁻²	3 · 10 ⁻⁴	10 ⁸
	Ударные трубы, эл. разряд	10 ⁻⁷	2	1	10 ⁻²	10 ⁴	10 ⁸
	-	10 ⁻⁸	-	-	40	10 ⁻⁵	10 ¹²
Конденсатор	-	10 ⁻³	-	-	100	10 ⁻⁴	10 ¹²
Роторная машина	-	10 ⁻⁴	-	-	100	10 ⁻⁴	10 ¹²
Индукц. накопитель	-	5 · 10 ⁻⁴	-	-	1000	10 ⁻³	10 ¹²
Аккумулятор	-	5 · 10 ⁻²	4	10 ⁵	10 ⁻³	10 ⁻⁶	10 ⁹
	Быстрый взрыв проволочек						
	Медленный взрыв проволочек	2 · 10 ⁻²	0.5	5 · 10 ²	10 ⁻³	10 ⁻⁴	10 ⁷
	Импульс. разряды	10 ⁻³	10	10 ⁴	10 ⁻⁴	10 ⁻³	10 ⁹
	Плазменный фокус	10 ⁻²	10 ³	10	10 ⁻⁴	10 ⁻⁵	10 ¹⁰
	Дуги высокого давления	10 ⁻⁵	2	10 ⁴	10 ⁻⁴	∞	10 ⁴
	Печные эксперименты	10 ⁻³	0.3	5 · 10 ³	10 ⁻³	∞	10 ³
	-	10 ⁻⁶	-	-	0.5 · 10 ⁻³	10 ⁻¹⁰	10 ¹³
	Мишень	10 ⁴	5 · 10 ³	10 ⁸	0.5	10 ⁻¹⁰	10 ¹³
	-	10 ⁻⁶	-	-	1	10 ⁻⁸	10 ¹³
Электронный пучок	5 · 10	10 ⁻⁴	10 ⁷	0.1	10 ⁻⁸	10 ¹³	

Таблица 3.1: Источники энергии и экспериментальные устройства, применяемые в физике высоких

интервале давлений до 11 ГПа и температур до 10^5 К и проникнуть со стороны газовой фазы в область плотностей, соответствующих конденсированной фазе. Так, например, максимальная плотность ксеноновой плазмы в экспериментах [68] достигала 4.5 г/см^3 , что превосходит плотность твердого ксенона примерно в 1.5 раза. Ударно-волновые эксперименты с жидким ксеноном при давлении до 140 ГПа дали ценную информацию об электронном спектре свехплотной плазмы.

Ударно-волновые эксперименты с применением химических взрывчатых веществ и баллистических установок [1], [87], [100], [150], [152] позволяют достигать в металлических образцах давлений порядка 1000 ГПа при температуре в десятки тысяч градусов. В этих условиях металлы расплавлены и, по существу, реализуется неупорядоченная электрон-ионная плазма, в которой электронная компонента является вырожденной или частично вырожденной. Применение мощных подземных взрывов [16], [119], [120], [113], [1], [46], нейтронного излучения, возникающего при подрыве ядерных устройств [203], а также концентрированного лазерного излучения [21] увеличивает давление до 100 ТПа. Такого рода эксперименты в области предельно достижимых параметров проводятся для проверки квазиклассических теорий [86].

Чрезвычайно интересная область состояний вблизи кривой кипения и окрестности критической точки недостижима ударным сжатием вещества. Исследовать промежуточные между твердым телом и газом плазменные состояния позволяет метод изоэнтропического расширения, основанный на регистрации состояний при разгрузке ударно-сжатого конденсированного вещества (траектории S_2 на рис. 3.7).

3.4.1 Определение уравнения состояния из экспериментов

Обсуждая ударно-волновые эксперименты с неидеальной плазмой, важно еще раз подчеркнуть, что определение состояния вещества в этих условиях базируется на фундаментальных законах сохранения. Современная экспериментальная техника обеспечивает также достаточно полную диагностику оптических и электрофизических свойств вещества в этих экзотических состояниях.

При распространении по веществу стационарного ударного разрыва на его фронте выполняются законы сохранения массы, импульса и энергии [69], которые связывают кинематические параметры - скорость ударной волны D и массовую скорость вещества за ее фронтом с термодинамическими величинами - плотностью $\rho = 1/V$, давлением p и внутренней энергией U [69]:

$$\rho = \rho_0 D / (D - u), \quad p = p_0 + \rho_0 D u, \quad U = U_0 + \frac{1}{2} (p + p_0) \left(\frac{1}{p_0} - \frac{1}{p} \right), \quad (3.1)$$

где ρ_0, p_0, U_0 - параметры покоящегося вещества, а ρ, p, U - параметры вещества за фронтом ударной волны. Для применения соотношений (3.1) в динамическом эксперименте необходима одномерность течения, что обычно обеспечивается выбором геометрии эксперимента и дополнительно контролируется прямыми измерениями [8]. Условие локального термодинамического равновесия обычно выполняется, поскольку, время релаксации установления процессов много меньше характерных времен эксперимента $\sim 10^{-6}$ сек. Если эти условия выполнены, то одновременное измерение в экспериментах величин D и u позволяет определить термодинамические параметры U, ρ, p без привлечения модельных теорий.

Таким образом, регистрация любых двух из пяти параметров U , p , V , D , u позволяет найти остальные кинематические и термодинамические параметры состояния за ударным фронтом. Наиболее легко и точно базисными методами измеряется скорость ударной волны D . Выбор второго измеряемого параметра зависит от конкретных условий эксперимента. В опытах с конденсированными средами чаще всего в качестве второго параметра измеряется скачок массовой скорости u . В случае же газовых сред, где сжатие в ударных волнах может быть десятикратным и более, даже малая погрешность в определении D и u приводит к весьма значительной неопределенности в определении плотности ударно-сжатого вещества. Анализ погрешностей показывает [105], [90], что в этом случае целесообразнее измерять непосредственно плотность ударно-сжатого вещества. В настоящее время разработана методика таких измерений, основанная на фиксации поглощения рентгеновского излучения. Хотя точность измерений плотности по поглощению проникающего излучения сравнительно невысока, суммарная погрешность определения состояния плазмы ударно-сжатых газов в этом случае оказывается в несколько раз меньшей, чем в опытах с измерением D и u .

Изменение состояния ударно-сжатого вещества при его разгрузке в простой волне описывается интегралами Римана [69]:

$$V = V_H + \int_{p_H}^p \left(\frac{\partial u}{\partial p} \right)^2 dp, \quad U = U_H - \int_{p_H}^p p \left(\frac{\partial u}{\partial p} \right)^2 dp,$$

которые вычисляются вдоль измеренной изоэнтропы $p_S = p_S(u)$.

Известно, что с точки зрения характера используемой термодинамической информации общим для описания гидродинамических процессов является то, что для этого требуется только "механическая" часть термодинамического описания - так называемое усеченное калорическое уравнение состояния $U(p, V)$. Соответственно, знание калорического УРС $U(p, V)$ в этом случае более важно, чем знание термического УРС. Ряд термодинамических характеристик полностью определяются усеченным калорическим УРС $U(p, V)$. К ним относятся дифференциальные характеристики: показатель изоэнтропы - γ_S , связанная с ним скорость звука a_S , а также параметр Грюнайзена $Gr \equiv V(\partial p / \partial U)_V$:

$$\gamma_S \equiv -(\partial \ln p / \partial \ln V)_S = [pV + V(\partial U / \partial V)_p] / p(\partial U / \partial p)_V, \quad a_S^2 = (p/\rho) \gamma_S. \quad (3.2)$$

Проведя серию измерений параметров ударных волн и волн разрежения при различных начальных условиях и давлениях ударного сжатия, получают массив экспериментальных данных для построения калорического уравнения состояния $U = U(p, V)$. Внутренняя энергия, однако, не является термодинамическим потенциалом по отношению к переменным p , V и для построения замкнутой термодинамики системы необходима дополнительная зависимость температуры $T = T(p, V)$. В оптически прозрачных средах температура измеряется совместно с другими параметрами ударного сжатия. Металлы же непрозрачны, так что световое излучение ударно-сжатой среды недоступно для регистрации.

Термодинамически полное уравнение состояния может быть построено непосредственно по результатам измерений $U = U(p, V)$ без привлечения моделей среды или каких-либо априорных соображений о свойствах и характере исследуемого вещества [69], [124], [144]. В качестве граничных условий задается температура в области

малых плотностей, где она может быть надежно рассчитана или измерена. Набор экспериментальных данных $U(p, V)$ и $\gamma(p, V) = pV/U(p, V)$ [41] для расчетов уравнения состояния представляется в форме степенных полиномов и дробно-рациональных функций. Определение точности полученного решения в зависимости от экспериментальных погрешностей и погрешностей в начальных данных осуществляется методом Монте-Карло путем моделирования на ЭВМ вероятностной структуры процесса измерения [144].

Измерение скорости фронта ударной волны и плотности плазмы позволяет при помощи законов сохранения (3.1) определить уравнение состояния в виде зависимости внутренней энергии U от давления p и удельного объема V . Однако уравнение состояния в таком виде является неполным, так как в него не входит температура - важный термодинамический параметр. Последняя при больших плотностях плазмы не может быть измерена традиционными оптическими методами из-за малого пробега светового излучения.

При определенных условиях решить указанную проблему возможно с помощью метода, предложенного Я.Б.Зельдовичем [53]. Этот метод является универсальным: его можно применять для построения уравнения состояния $p(V, T)$ любых сред по данным экспериментов с ударными волнами. Ниже рассмотрим способ практической реализации этого метода [144]. Из первого начала термодинамики следует

$$\left[p + \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_p \right] \frac{\partial T}{\partial p} - \left(\frac{\partial U}{\partial p} \right)_V \frac{\partial T}{\partial V} = T, \quad (3.3)$$

Решением этого неоднородного дифференциального уравнения первого порядка в частных производных является интересующая нас зависимость $T(p, V)$. Решение уравнения (3.3) строится на основе решения характеристической системы уравнений

$$\frac{dp}{dV} = - \frac{p + (\partial U/\partial V)_p}{(\partial U/\partial p)_V}, \quad \frac{dT}{dV} = - \frac{T}{(\partial U/\partial p)_V}. \quad (3.4)$$

Легко видеть, что характеристические уравнения совпадают с соотношениями для изоэнтроп. В случае одномерного идеального газа $U = 3/2pV$ и уравнения (3.4) интегрируются:

$$\frac{p}{p_0} = \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-5/3}, \quad \frac{T}{T_0} = \left(\frac{V}{V_0} \right)^{-2/3},$$

что совпадает с адиабатами Пуассона с показателем $k = 5/3$. Из характеристических уравнений (3.4) следуют решения которые строятся методом характеристик

$$U = U_0 \exp \left\{ - \int_{V_0}^V \gamma(V, U) d \ln V \right\},$$

$$T = T_0 \frac{pV}{p_0 V_0} \exp \left[- \int_{V_0}^V \left(\frac{\partial \ln \gamma(U, V)}{\partial \ln V} \right) d \ln V \right].$$

Уравнения (3.4) дополняются граничными условиями: температура T_0 должна быть задана в области, где либо возможно ее экспериментальное измерение, либо уверенный теоретический расчет. Если положение изоэнтропы в $p - V$ плоскости известно

из теории или эксперимента, то второе уравнение (3.4) интегрируется вдоль этой изоэнтропы

$$T = T_0 \exp \left\{ - \int_{V_0}^V \left(\frac{\partial U}{\partial p} \right)_V^{-1} dV \right\}. \quad (3.5)$$

Таким образом, из решения уравнений (3.4) определяется $T = T(p, V)$, что наряду с известной из эксперимента зависимостью $U(p, V)$, завершает построение термодинамически полного уравнения состояния вещества по экспериментам с ударными волнами.

Будем считать, что из ударно-волновых экспериментов имеется некоторое количество N экспериментальных точек $\{U_i, V_i, p_i\}_{i=1}^N$ произвольно расположенных в $p-V$ плоскости. Для построения по этим данным аналитической зависимости $U(p, V)$ (или более удобной функции $\gamma(p, V) = pV/U(p, V)$) необходимо решить задачу регрессионного анализа для функции двух независимых переменных. Указанные зависимости представляют в форме степенных рядов [144] или дробно-рациональных функций [41]. Определение точности полученного решения в зависимости от экспериментальных погрешностей и начальных данных осуществляется методом Монте-Карло путем моделирования на ЭВМ вероятностной структуры процесса измерения [144]. Построив таким образом уравнение состояния $U(p, V)$ (или $\gamma(p, V)$) можно вычислить по формуле (3.5) температуру.

Восстановление температуры по калорической поверхности $(\partial U/\partial p)_V$ и ее производной не всегда приводит к удовлетворительной точности, поскольку экспоненциальная связь (3.5) между T и $(\partial U/\partial p)_V$ требует обеспечения малости ошибок в определении производных до второго порядка включительно (т.е. определения с высокой точностью кривизны поверхности $U(p, V)$). Чтобы избежать экспоненциальной связи между T и $(\partial U/\partial p)_V$, можно вместо поверхности $U(p, V)$ строить на основе экспериментальных данных поверхность энтропии $S(U, V)$, имея на основе уравнений (3.1) набор экспериментальных точек V_i и $U_i(D_i, V_i)$ ($i = 1, 2, \dots, N$).¹

Из уравнения в полных дифференциалах, выражающее первое начало термодинамики, для энтропии имеем

$$\left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_U = \left(\frac{\partial S}{\partial U} \right)_V p. \quad (3.6)$$

Таким образом энтропия удовлетворяет однородному линейному дифференциальному уравнению (3.6) в частных производных с известными краевыми условиями U_0 и V_0 . Решение этого уравнения может быть сведено к интегрированию обыкновенных дифференциальных уравнений методом характеристик. Поскольку $S = const$ для всякого решения системы (характеристической) на V, U плоскости, то

$$\frac{dV}{dt} = 1, \quad \frac{dU}{dt} = -p(U, V), \quad (3.7)$$

где t - параметр.

Решение этой системы, очевидно, образует семейство изоэнтроп. Так как поле характеристик коллинеарно оси V , то в (3.7) можно исключить параметр t и произвести

¹Идея была предложена Дубовицким В.А.

переход к скалярному дифференциальному уравнению

$$\frac{dU}{dV} = -p(U, V). \quad (3.8)$$

При решении уравнения (5.2) необходимо помнить, что начальное условие V_0 есть параметр изоэнтропы, равный абсциссе пересечения ею оси $U(V_0)$. В принципе, интегрирование уравнений (5.2) полностью решает задачу восстановления энтропии по ее граничным значениям в области, заполненной характеристиками-изоэнтропами.

Зная поверхность энтропии $S(U, V)$ температуру можно вычислить, используя простое термодинамическое соотношение $(\partial S/\partial U)_V = 1/T$.

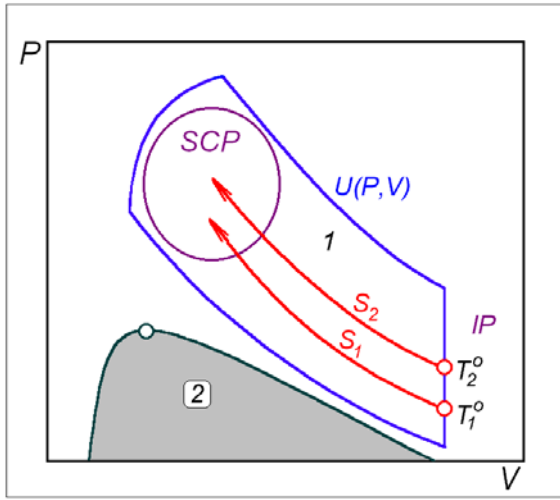


Рис. 3.8: Восстановление температуры по экспериментально измеренному калорическому УРС. Обозначения: IP - идеальная плазма; SCP - сильнеидеальная плазма; 1 - Область с экспериментально измеренным уравнением состояния $U(p, V)$; 2 - двухфазная область газ-жидкость; S_1, S_2 - изоэнтропы $S = const$; T_1^o, T_2^o - известная температура на границе области измерений

Таким образом, используя уравнение (3.6) можно избежать экспоненциальной зависимости между измеряемыми и вычисляемыми термодинамическими параметрами и, тем самым, повысить точность определения температуры по результатам экспериментов.

Методика определения температуры по измерениям калорического уравнения состояния была реализована для случая плазмы цезия в серии работ [144], [41], и др. и для меди [146] Процедура состояла из трех шагов:

- А) - гладкая аппроксимация единой аналитической поверхностью $U^*(p, V)$ всей совокупности экспериментальных данных о реальной $U(p, V)$ вещества в максимально возможно широкой области p, V - плоскости
- В) - последующее восстановление семейства изоэнтроп $p^* = p(\rho)|_{S=const}$ согласно (4.49)
- С) - интегрирование вдоль каждой изоэнтропы следующего из (3.9) относительного изменения температуры с использованием производных от функции $U^*(p, V)$

Полученное таким образом относительное изменение температуры вдоль каждой из изоэнтроп связывалось затем со значением температуры T_0 в области малых плотностей, где неидеальность плазмы цезия была минимальна, и где эта температура считалась известной.

$$\ln(T/T_0)|_{S=const} = \int_V^{V_0} \left(\frac{dp}{dU^*} \right)_V dV \quad (3.9)$$

Результаты такой процедуры использовались для дальнейшего анализа термодинамики плазмы в области с заметной неидеальностью и селекции приближенных

моделей неидеальности (см. подробнее [105], [17], [32]). Описанная схемы восстановления температуры иллюстрируется на рис. ??.

Соотношению (3.9) целесообразно придать следующий вид [59],

$$\left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \ln V}\right)_S = 1 + \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln V}\right)_U \quad \text{либо} \quad \left(\frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial \ln p}\right)_S = 1 + \left(\frac{\partial \ln V}{\partial \ln p}\right)_H. \quad (3.10)$$

Соответственно

$$\ln(T/T_0)|_{S=const} = \int_{V_0}^V \left[1 + \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln V}\right)_U\right] d \ln V = \int_{p_0}^p \left[1 + \left(\frac{\partial \ln V}{\partial \ln p}\right)_H\right] d \ln p \quad (3.11)$$

Форма (3.10) подчеркивает тот факт, что темп роста величины фактора сжимаемости $\mathcal{Z} \equiv pV/RT$ при изоэнтропическом сжатии вещества непосредственно связан с наклоном в p, V -плоскости линий постоянства внутренней энергии U (либо энтальпии H). Следует принять во внимание тот факт, что в области "газовой" плазмы ($\rho \ll \rho_{кр}$) линии $U = const$ и $H = const$ очень близки к линиям $pV = const$ (т.е. справедливо $(\partial \ln p / \partial \ln V)_U \sim (\partial \ln V / \partial \ln p)_H \sim -1$ (см. рис. 4.20)), так что фигурирующие под интегралом (3.11) выражения, интегрируемые вдоль изоэнтропы, оказываются малой разностью близких величин. В результате описанная выше процедура восстановления температуры, будучи устойчива [144] к случайным колебаниям поверхности $U^*(p, V)$, оказывается чувствительной к малому, но систематическому отклонению этой поверхности от истинной. Опыт показывает [16], что для успеха всей процедуры оказывается важной функциональная форма пробной функции $U^*(P, V)$. А.В.Бушману удалось сконструировать адекватную форму широкодиапазонного аппроксимационного УРС (см. напр. [6]), сочетающую, с одной стороны, необходимую гибкость для единой аналитической аппроксимации набора экспериментальных данных, относящихся одновременно к разным фазам (твердой, жидкой и газовой (плазменной)), и с другой стороны, учитывающую уже в рамках принятой функциональной формы пробного УРС специфические особенности термодинамики описываемых фаз. Следует подчеркнуть в заключение, что реализация описанной выше процедуры восстановления температуры по калорическому уравнению состояния $U(P, V)$ не снимает необходимости прямого измерения температуры (или энтропии) в динамических экспериментах.

3.4.2 Динамическое сжатие плазмы цезия

Цезий обладает наименьшим из практических доступных элементов потенциалом ионизации 3.89 эВ, что позволяет получать высокую концентрацию зарядов n_e при умеренных температурах, обеспечивая тем самым высокие значения параметров неидеальности при относительно невысоких энергозатратах экспериментальных установок. Поэтому этот элемент наиболее популярен в экспериментах с неидеальной плазмой. Его фазовая диаграмма с доступными для различных методик областями параметров представлена на рис. 3.9. Динамическая генерация цезиевой плазмы осуществлялась адиабатическим (состояния 4) и ударным сжатием насыщенных паров во фронте прямой (6) и отраженной (7) ударных волн.

Опыты по динамическому сжатию цезиевых паров выполнены [105], [41] на пневматической диафрагменной ударной трубе [89], [105], схема которой приведена на

рис. 3.10. В целях получения высоких начальных давлений насыщенных паров установка длиной 4 м и внутренним диаметром 4.5 см нагревалась до температуры 700°C. Ионизирующая ударная волна создавалась при разрыве диафрагмы, разделяющей пары цезия и сжатый инертный газ - гелий, аргон или их смеси при давлении до ≈ 0.1 ГПа.

Измерения проводились как в прямой ударной волне, так и в ударной волне, отраженной от закрытого торца трубы. Измерялись скорость фронта ударной волны и плотность ударно-сжатой плазмы. Длина волны зондирующего рентгеновского излучения выбиралась из соображений максимальной чувствительности и минимальной статистической погрешности измерений плотности и составляла $(0.2 - 0.5) \cdot 10^{-8}$ см. Полученные рентгенограммы свидетельствуют об отсутствии заметной конденсации ударно-сжатого цезия и позволяют определить плотность плазмы с погрешностью 5-10%.

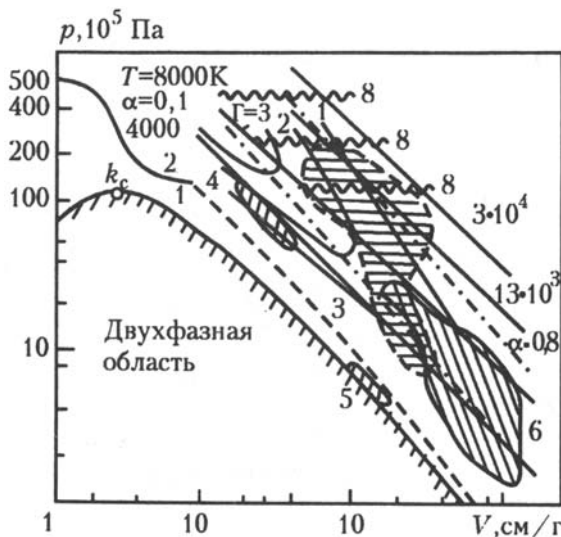


Рис. 3.9: Фазовая диаграмма цезия: 1 - кривая насыщения, статические эксперименты, 2, 3 - область статических экспериментов, 4 - область изэнтропического сжатия из начальных состояний 5 [90], [196], 6, 7 - сжатие прямой и отраженной ударными волнами, 8- электрический взрыв. α - степень ионизации, Γ - степень неидеальности.

ра [54] на частотах 0.2 - 2 МГц. Катушка индуктивности в виде плоской спирали помещалась в торец ударной трубы (рис. 3.10). Под влиянием электропроводной плазмы, образующейся за фронтом отраженной ударной волны, индуктивность катушки изменялась. В условиях этих опытов ($10 < p < 150 \cdot 10^5$ Па, $4000 > T > 2500$ К) малы эффекты непарности и корреляции атомов, а также кластерные эффекты, что позволяет выделить кулоновскую компоненту коэффициента электропроводности и сопоставить ее с плазменными теориями.

В том случае, если наибольший интерес представляет слабоионизованная плазма с сильным взаимодействием зарядов с нейтральными частицами, эффективным является метод адиабатического сжатия. В этом методе отсутствуют эффекты необратимости и поэтому удается получить пониженные, по сравнению с ударно-волновым

Эксперименты по ударному сжатию цезия проводились в оптимальной с точки зрения эффектов неидеальности области параметров: при начальных давлениях $(0.04 - 0.5) \cdot 10^5$ Па и скоростях ударных волн $(0.8 - 3) \cdot 10^5$ см/с, что соответствует значительной области фазовой диаграммы: $p \sim (1.4 - 200) \cdot 10^5$ Па, $T \sim 2600 \div 20000$ К, $n_e \sim 5 \cdot 10^{15} \div 5 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$, где кулоновская неидеальность максимальна: $\Gamma = 0.2 \div 2.2$. Существенного области параметров за па-дающей и отраженной ударными волнами частично перекрываются и в нижней своей части соответствуют идеальной плазме, что важно для расчетов температуры.

Статическая электропроводность ударно-сжатой плазмы цезия измерялась индукционным методом (погрешность 20 - 40%) по схеме параллельного колебательного конту-

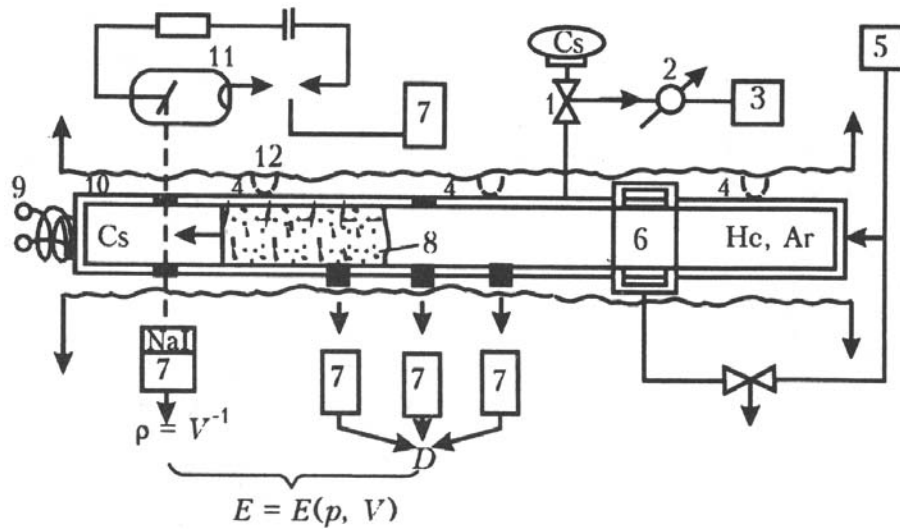


Рис. 3.10: Схема подогреваемой ударной трубы [105], [41]: 1 - пневмокраны, 2 - система измерения начального давления, 3 - объем с жидким цезием, 4 - термопары, 5 - толкающий газ, 6 - блок диафрагмы, 7 - фотоумножители, 8 - ударно-сжатая плазма, 9 - катушка измерения коэффициента электропроводности, 10 - бериллиевые окна, 11 - рентгеновская трубка, 12 - электрообогреватель.

методом, температуры и значительные плотности вещества [90], [196], [96], [109]. Соответствующие установки были разработаны в сороковых годах [109] и позволили провести уникальные измерения характеристик сверхплотных газов при температурах до $9 \cdot 10^3 \text{ K}$ и давлениях до 0.1 ГПа. В качестве примера на рис. 3.11 показана схема установки с тяжелым поршнем [196], на которой были проведены измерения электропроводности плазмы при степени адиабатического сжатия до ~ 25 , что соответствует давлению 33 МПа и температурам 4900 – 6100 K.

3.5 Сжатие инертных газов мощными ударными волнами

Анализ экспериментов с цезием выявил значительный вклад связанных состояний в термодинамику плотной плазмы, что сделало необходимым расширение исследуемой области параметров и переход к экспериментам с другими химическими элементами. Такая задача потребовала существенного увеличения интенсивности ударных волн. Необходимые высокие параметры ударных волн удается получить с использованием конденсированных ВВ. Работа [149] является первым исследованием, где взрывная техника была применена непосредственно для фиксации ударной адиабаты газообразного аргона. Сходная техника затем использовалась в [194] для регистрации ударных адиабат воздуха атмосферного давления с последующим определением на этой основе энергии диссоциации азота. В серии последующих работ взрывные ударные волны в инертных газах и воздухе применялись как источник интенсивного оптического излучения для высокоскоростной фотографии, накачки лазеров, возбуждения детонации, изучения воздействия излучения на вещество, в спектроскопических исследованиях и т.п. [98]. Ввиду того что начальное давление газа в этих устройствах не превосходило 10^5 Па , эффекты неидеальности в такой плазме не успевали заметно проявиться, да они и не являлись предметом исследований.

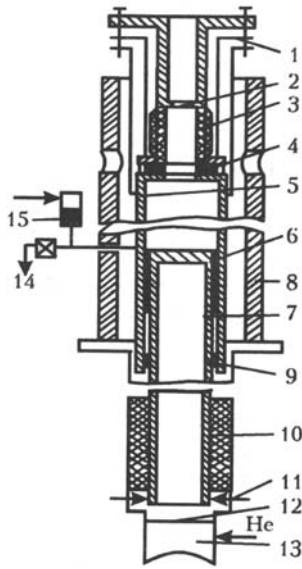


Рис. 3.11: Схема установки для адиабатического сжатия цезия [196]: 1 - регулировка уплотнения, 2 - фольга, 3 - датчик проводимости, 4 - бериллий, 5 - ствол, 6 - медная насадка, 7 - поршень, 8 - обогреватель, 9 - тефлон, 10 - датчик перемещения, 11 - контакты для запуска приборов, 12 - мембрана, 13 - толкающий газ, 14 - откачка, 15 - жидкая фаза.

ния параметра неидеальности достигаются при скоростях движения ударных волн D в аргоне $\sim 9 \cdot 10^5$ см/с и в ксеноне $\sim 5 \cdot 10$ см/с. При этом увеличение D приводит к перегреву и росту кратности ионизации плазмы, а увеличение начального давления - к ее вырождению.

Во взрывной ударной трубе [129], [34], [75], [101], схема которой приведена на рис. 3.12, ионизирующая ударная волна образуется в результате детонации мощного конденсированного взрывчатого вещества - гексогена. Применение детонационной линзы и выбор соответствующих размеров активного заряда ВВ обеспечивали одномерность и стационарность параметров детонационного фронта при выходе его из ВВ в исследуемый газ. С применением подобных устройств проведен цикл исследований плазмы аргона при давлении $\sim (1.6 - 5.8) \cdot 10^8$ Па, температуре $\sim (15.5 - 23) \cdot 10^3$ К, параметре неидеальности $\sim 1.3 \div 2.2$ и концентрации электронов $n_e \sim (1.5 - 3.5) \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$. Скорость фронта ударной волны измерялась [34] оптическим и электроконтактным базисным методами с помощью скоростных кинокамер и ионизационных датчиков. Плотность ударно-сжатой аргоновой плазмы регистрировалась методом импульсной рентгенографии. Измерения проводились в условиях однократного и двукратного (ступенчатого) ударного сжатия.

Помимо давления, энергии и степени сжатия в ударной волне, в экспериментах с плазмой инертных газов проводились измерения ее оптических и электрических свойств. Ввиду прозрачности газа перед фронтом ударной волны тепловое излучение может беспрепятственно выходить из плазменного объема, что дает возможность измерений температуры и коэффициентов поглощения ударно-сжатой плазмы [98], [103]. При измерении температуры яркостным методом [34], [35] интенсивность излучения сравнивалась со свечением эталонных источников света-капиллярного источ-

Специальные эксперименты по изучению влияния неидеальности на физические свойства взрывной плазмы были поставлены в начале 70-х годов. В качестве объекта исследования в этих работах выбраны инертные газы. Отсутствие сложных молекулярных и ионно-молекулярных образований в инертных газах и детальная изученность элементарных процессов существенно облегчают интерпретацию результатов измерений.

Для оценки оптимальных условий экспериментов и выбора принципиальных схем генераторов плазмы проведены компьютерные расчеты [29] теплофизических и газодинамических характеристик ударных волн в плотных инертных газах. Выяснилось, что оптимальные значе-

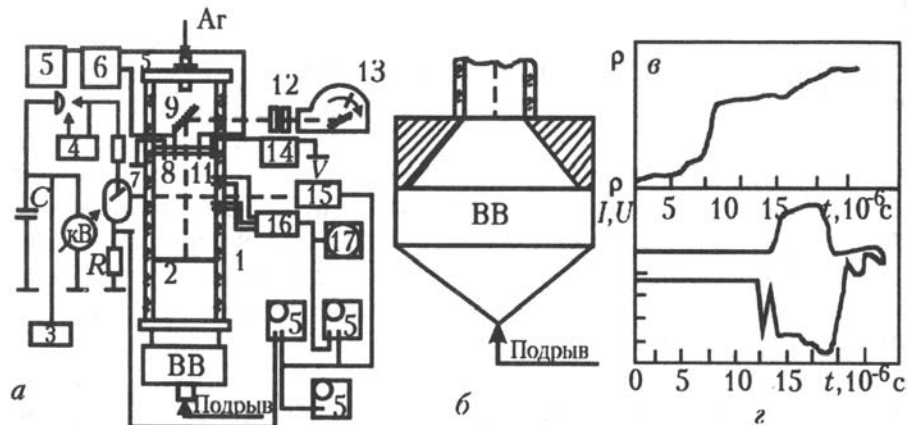


Рис. 3.12: Схема экспериментов на взрывном генераторе неидеальной плазмы: а - диагностика, б - кумулятивный заряд, в - рентгенограмма плотности плазмы, г - осциллограммы тока и напряжения, 1 - канал генератора, 2 - заряд ВВ, 3, 4 - питание и блок управления рентгеновской трубки, 5 - осциллографы, 6 - дифференциальный усилитель, 7 - рентгеновская трубка, 8 - потенциальные и токовые зонды для регистрации коэффициента электропроводности, 9 - зеркало, 10 - преграда из оргстекла, 11 - зонды для измерения скорости ударной волны, 12 - фильтры и ослабитель, 13 - скоростная кинокамера, 14 - источник постоянного тока, 15 - ФЭУ с ослабителем, 16 - питание электроконтактов, 17 - осциллограф для регистрации скорости.

ника света с температурой $39700 \pm 700 \text{ K}$ и ударной волны в воздухе с температурой $11800 \pm 600 \text{ K}$. В специальной серии методических экспериментов, а также оценками показано отсутствие в этих условиях известного эффекта самоэкранирования из-за нагрева газа перед фронтом ударной волны ультрафиолетовым излучением плазмы за фронтом. По данным [98], этот эффект становится заметным для аргона с начальным давлением $p_0 = 10^5 \text{ Па}$ при скорости ударной волны $D > 15 \text{ км/с}$, а для ксенона - при $D > 8 \text{ км/с}$ и падает с ростом начального давления газа.

Электропроводность несет ценную информацию о структуре плазмы, элементарных процессах в ней и потому является существенной характеристикой. Ввиду высокого уровня электропроводности для ее измерения применимы простые зондовые методы [75], [101], [96], [102]. Характерные осциллограммы тока а и напряжения б, представлены на рис. 3.12 в, где хорошо выделяется "пробка" ударно-сжатой плазмы.

В результате экспериментов были получены данные по коэффициенту электропроводности плазмы ксенона [101] в сильно закритических условиях $\rho \sim 1 \div 4 \text{ г/см}^3$ ($\rho_{кр} \sim 1.1 \text{ г/см}^3$) при высоких давлениях и температурах: $p \sim (2 \div 11) \text{ ГПа}$, $T \sim (1 - 2) \cdot 10^4 \text{ K}$, где реализуется широкий спектр сильных межчастичных взаимодействий с участием нейтральных и заряженных частиц.

Фазовая диаграмма ксенона представлена на рис. 3.13. Исследованная область параметров I простирается от состояний пониженной плотности II, где термодинамические и электрофизические свойства вещества описываются плазменными моделями, и непосредственно примыкает к полученной динамическим сжатием жидкого ксенона области плотностей III, описываемых зонной теорией твердых тел.

Стремление получить плазму с высокими параметрами неидеальности заставляет проводить эксперименты при относительно невысоких температурах $T \sim 20000 \text{ K}$, где плазма, как правило, ионизована не полностью [90], [41], [34], [103].

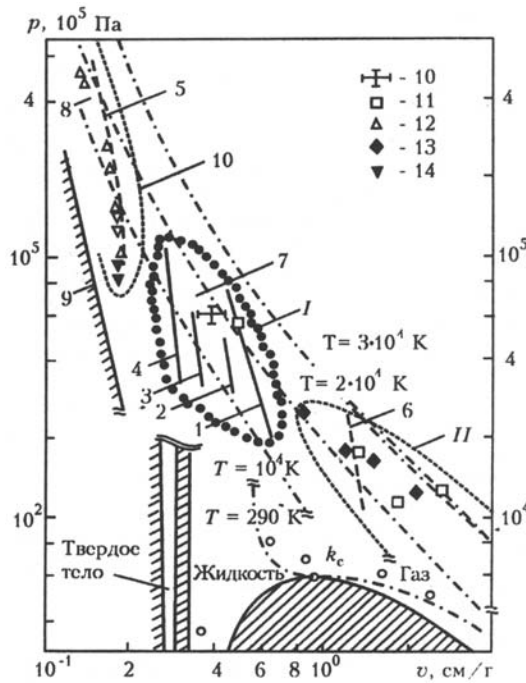


Рис. 3.13: Фазовая диаграмма ксенона. I, II - опыты с отраженными и падающими ударными волнами, III - ударное сжатие жидкого ксенона. Расчетные адиабаты: 1 - $p_0 = 5$ МПа, 2 - 6, 3 - 7, 4 - 8, 5 - $p_0 = 0.28$ МПа, $T_0 = 165$ К, 6 - $p_0 = 0,2$ МПа, 7 - ударная адиабата вторичного сжатия [101], 8 - расчет по зонной модели [178], 9 - изотерма $T = 0$ К. Данные термодинамических измерений: 10 - метод отражения [101], 11 - [132], 12 - [178], [189]. Данные измерений коэффициента электропроводности: 13 - [75], 14 - [189].

Вместе с тем, изучение многократно ионизированной неидеальной плазмы представляет значительный интерес, позволяя исследовать чисто кулоновские эффекты в сильно разогретой среде. Использование отраженных ударных волн дало возможность при пониженных начальных давлениях продвинуться в область многократной ионизации и получить плазму при температурах свыше 20000 К [96], [102]. Этой же цели служат кумулятивные взрывные ударные трубы [96], [102], показанные на рис. 3.13. Усиление ударной волны здесь происходит в результате

конического схождения потока толкающего газа [68]. С применением этих устройств получены скорости ударных волн в ксеноне $8 - 15$ км/с при начальных давлениях до 1 МПа. Это соответствует температурам плазмы порядка $(3 - 10) \cdot 10^4$ К.

Для измерений термодинамических и оптических характеристик плазмы при более высоких давлениях применялись взрывные генераторы ударных волн различной интенсивности [132], [51] и длительности, схематически показанные на рис. 3.14. В этих установках ионизирующие ударные волны в исследуемых газах создавались плоскими металлическими ударниками, разогнанным взрывом до скорости $4 - 6$ км/сек. Измерялись скорость фронта ударной волны в газе и массовая скорость ударно-сжатой плазмы. Измерения проводились с помощью открытых (для скорости ударной волны) и закрытых (для массовой скорости) электроконтактных датчиков, либо фотохронографированием процесса. В последнем случае на некотором расстоянии от мишени устанавливалась преграда из оргстекла, через которую при помощи скоростного фотохронографа регистрировалось свечение ударно-сжатой плазмы. Свечение возникает в момент входа ударной волны в исследуемый газ, скачкообразно усиливается в момент отражения ударной волны от преграды (что определяет D) и пропадает в момент прихода к мишени поверхности экрана (что определяет u). Кроме того, яркостным методом измерялась температура ударно-сжатой плазмы. Применение скоростных многоканальных спектрометров снабженных электронно-оптическими преобразователями и цифровой системой регистрации дало возмож-

ность измерять эмиссионный спектр ударно-сжатой плазмы и анализировать сдвиг и уширение ее спектральных линий.

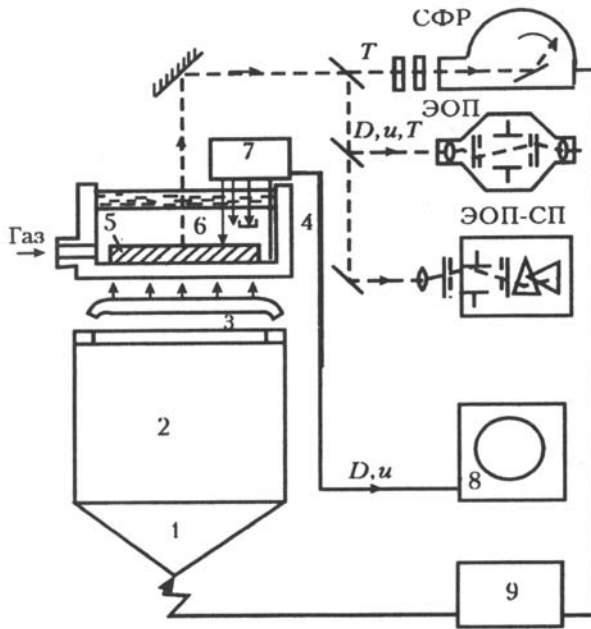


Рис. 3.14: Схема экспериментов по взрывному сжатию плазмы инертных газов: 1 - детонационная линза, 2 - заряд ВВ, 3 - металлический ударник, 4 - экспериментальная сборка, 5 - мишень, 6 - исследуемый газ, 7 - электроконтакты и блок формирования импульсов, 8 - осциллографы, 9-блок синхронизации и подрыва.

но сжатой плазмы аргона и ксенона при давлениях до 0.13 ТПа и максимальных температурах до 30000 К, $n_e \sim 5.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$. В этих условиях сильного сжатия (максимальная плотность ядер $\sim 5.7 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$) наблюдается отчетливая деформация электронного энергетического спектра плазмы. При этом значительное количество электронов находится в термически возбужденном состоянии, а в целом сильно сжатая плазма обладает "полупроводниковыми" свойствами [189].

Интересные результаты по теплофизике неидеальной плазмы аргона и ксенона получены на установке адиабатического сжатия [168]. Исследуемый газ начального давления $\sim 2000 \text{ Па}$ сжимался тяжелым (массой 4.9 кг) поршнем в стальном канале длиной 7.5 м и диаметром 150 мм. Давление адиабатического сжатия фиксировалось пьезоэлектрическим датчиком, а положение поршня определяло степень сжатия. Кроме того, оптическим методом регистрировалось тепловое излучение плазмы, что давало информацию об эмиссионных спектрах и равновесной температуре. Зондовые методы использовались для фиксации электропроводности плотной плазмы. Эта уникальная установка позволила провести измерения при температурах до $\sim 14000 \text{ К}$ при давлениях до 14.5 ГПа и концентрациях электронов до 10^{20} см^{-3} , что заметно расширило доступную для эксперимента область фазовой диаграммы неидеальной плазмы и дало возможность проверить применимость асимптотических теорий.

Излучение частично прозрачной среды за фронтом ударной волны нарастает по

Результаты измерений ударных адиабат аргона и ксенона оптическим, электроконтактным и рентгеновским методами суммированы на рис. 3.15. Полученные результаты по уравнению состояния неидеальной плазмы аргона и ксенона относятся к широкому диапазону параметров (рис. 3.13 и 3.16): $p \sim (0.3-40) \cdot 10^8 \text{ Па}$, $T \sim (5.2-60) \cdot 10 \text{ К}$, $n_e \sim 10^{14} \div 3 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$, где реализуется развитая ионизация $\alpha \approx 3$ и сильное кулоновское взаимодействие $\Gamma \approx 10^{-2} \div 5.2$. В этих опытах получены сведения об уравнении состояния плазмы с плотностью $\rho \sim 1.3 \text{ г/см}^3$, которая превосходит критическую плотность ксенона. В работах [178], [189], [205] исследования уравнения состояния плазмы аргона и ксенона твердотельных плотностей проведены с использованием двухступенчатой легкогазовой баллистической установки. Получены уравнения состояния сильно

мере распространения волны и, соответственно, увеличения толщины излучающего слоя. Это явление используется для измерения коэффициента поглощения плазмы ударно-сжатых газов κ_ν [103], [32]. Ввиду малого времени фотонной релаксации по сравнению с характерным газодинамическим временем спектральная интенсивность излучения такого слоя $J_\nu(t)$ в квазистационарном приближении [84] имеет вид:

$$J_\nu(t) = J_\nu^0(1 - \exp\{-\kappa'_\nu(D-u)t\}),$$

где $J_\nu^0 = J_\nu(\infty)$ - планковская интенсивность излучения, $\kappa'_\nu = \kappa_\nu(l - e^{-h\nu/kT})$ - исправленный на вынужденное излучение коэффициент поглощения, D, u - скорости движения передней и задней границ излучающего слоя.

Схема экспериментов изображена на рис. 3.17 а. Для передачи излучения плазмы ударно-сжатых газов на регистрирующую аппаратуру, удаленную на расстояние 10-15 метров, использовались волоконные световоды. Регистрация широкого участка спектра излучения проводилась с помощью электроннооптического фотохронографа [33]. Наряду с этим проводились непрерывные измерения интенсивности излучения в нескольких (до шести) узких частотных диапазонах. Для этого световое излучение плазмы с помощью полупрозрачных зеркал делилось на несколько пучков, которые пропускались через узкополосные интерференционные фильтры и поступали на отдельные фотоумножители. Типичная осциллограмма тока ФЭУ, полученная в опыте с аргоном, показана на рис. 3.17 б. Вход ударной волны в аргон вызвал появление и нарастание светового излучения до его насыщения. Всплеск яркости отмечает момент выхода ударной волны на твердую поверхность окна емкости с газом. Этот всплеск дает возможность измерить, одновременно с регистрацией оптических характеристик плазмы, скорость фронта ударной волны. Последующая отсечка излучения вызвана разрушением окна донной пластиной емкости, движущейся со скоростью u .

Таким образом, постановка опытов дает возможность получить в одном эксперименте разнообразную физическую информацию. Нарастание интенсивности $J_\nu(t)$ на начальном участке используется для измерения коэффициента поглощения света в плазме, а уровень насыщения излучения $J_\nu(\infty)$ - яркостную температуру. Регистрация отражения ударной волны от преграды позволяет измерить D и u , что с учетом законов сохранения эквивалентно прямому измерению давления, плотности

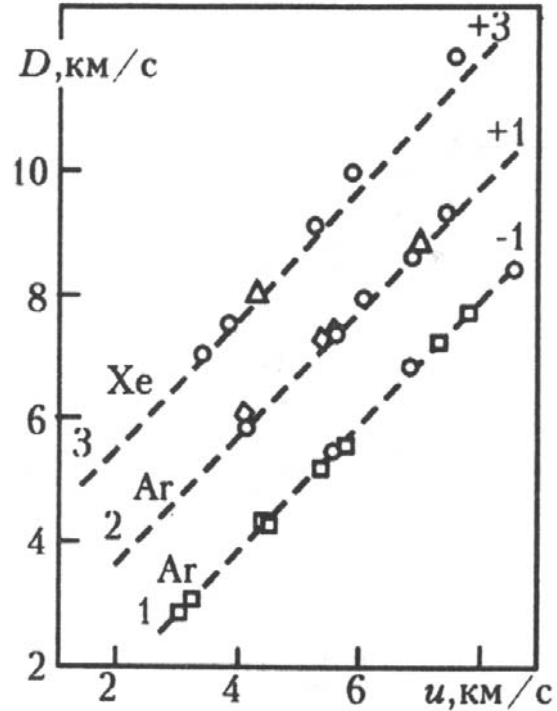


Рис. 3.15: Ударные адиабаты аргона и ксенона: 1 - $p_0 = 0.78 \cdot 10^5$ Па, 2 - $p_0 = 5 \cdot 10^5$ Па, 3 - $p_0 = 10^6$ Па. Измерения различными методами: \diamond -оптика [149], Δ - электроконтакты [132], ∇ - рентгеновские методы [34], ∇ - оптика [96], \circ - электроконтакты и оптика [51], штриховая линия - расчет [29]. Цифры справа - сдвиги каждого графика по скорости фронта D , u - массовая скорость.

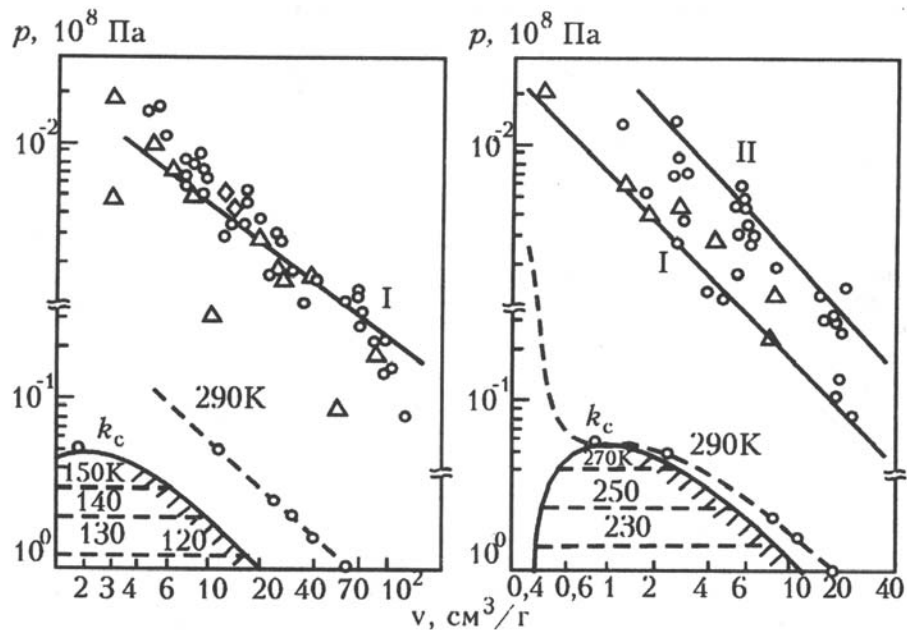


Рис. 3.16: Фазовые диаграммы аргона а) и ксенона б): I и II -границы одно- и двукратной ионизации, K_c - критическая точка, штриховая линия - граница двухфазной области, штрихпунктир - критическая изохора V_{K_c} , точки-результаты динамических экспериментов согласно рис. 3.15.

и внутренней энергии. Спектральные измерения были выполнены в [33] для аргоновой плазмы при $T \sim 17.7 \cdot 10^3 \text{K}$ и концентраций электронов $n_e \sim 1.2 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$, выше которых уширение спектральных линий настолько велико, что не позволяет их выделить.

Данный способ регистрации κ_ν оказывается ограниченным со стороны малых плотностей плазмы из-за того, что затухание ударной волны начинается в этом случае раньше, чем достигается насыщающая толщина излучающего слоя. Поэтому при регистрации малых коэффициентов поглощения были поставлены эксперименты [35] в несколько измененной редакции, использующей взрывные ударные трубы в качестве источника плазмы воздуха. Затухание ударных волн в таких системах приводило к появлению максимума регистрируемой зависимости $J_\nu(t)$, положение которого позволяло найти в каждом опыте значение κ'_ν , а другие параметры ударного сжатия оценить на основе газодинамических данных. Полученные результаты послужили основой для оценки сечения фотораспада отрицательного иона азота.

Изучение высокочастотной проводимости плазмы, получаемой в ударных волнах, в поле электромагнитной волны проводилось путем измерения ее отражательной способности. Этот метод достаточно широко известен в физике металлов и полупроводников, где он используется для определения энергетического спектра, концентрации и эффективных масс носителей заряда. Особый интерес при этом представляет область резонансного взаимодействия, когда частота падающей электромагнитной волны ω_λ сравнима с плазменной частотой ω_p . В этом случае условие резонанса $\omega_\lambda = \omega_p$ соответствует сильному отражению падающего излучения и определяет электронную концентрацию, а дисперсия кривой отражения характеризует потери энергии электронов, позволяя найти частоту электронных столкновений.

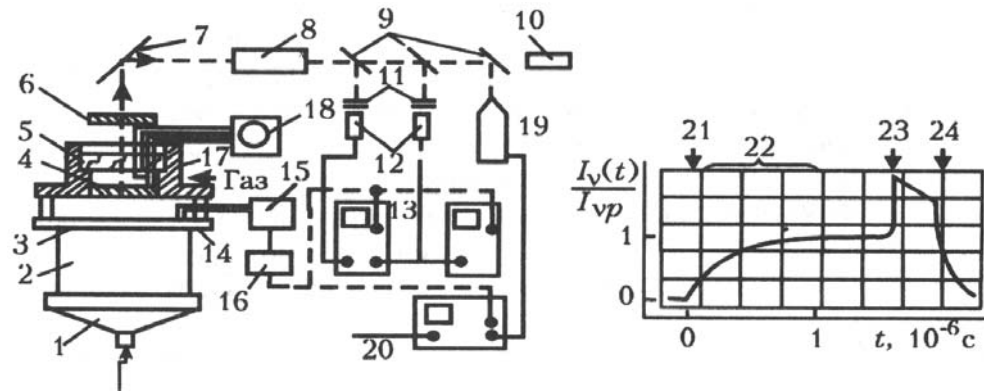


Рис. 3.17: Схема эксперимента по регистрации оптических свойств ударно - сжатой плазмы [32]: а - схема измерений, б - оптический сигнал, 1 - детонационная линза, 2 - заряд ВВ, 3 - ударник, 4 - мишень, 5 - прозрачная преграда, 6 - диафрагма, 7 - зеркало, 8 - оптическая система, 9 - полупрозрачные зеркала, 10 - юстировочный лазер, 11 - интерференционные светофильтры, 12 - фотоэлектронные умножители, 13 - осциллографы, 14 - электроконтакты измерения скорости ударника, 15 - схема формирования импульсов, 16 - линия задержки, 17 - электроконтакты измерения скорости ударной волны, 18 - осциллограф для измерения скорости ударной волны, 19 - скоростной спектрометр, 20 - система цифровой обработки спектра, 21 - выход ударной волны из мишени в газ, 22 - участок нарастания излучения, 23 - столкновение ударной волны с преградой, 24 - разрушение преграды материалом мишени.

Эксперименты по измерению отражения лазерного излучения от неидеальной плазмы ксенона [68] осуществлялись с использованием взрывных генераторов ударных волн в установке, подобной показанной на рис. 3.17. Варьирование электронной концентрации в ксеноновой плазме осуществлялось изменением начальных параметров ксенона $p_0 \sim 1 \div 5.7 \text{ МПа}$, $\rho = 0.06 \div 0.8 \text{ г/см}^3$, $T_0 = 270 \text{ К}$. Ввиду значительного собственного теплового излучения ударно-сжатой плазмы с $T \sim 3 \cdot 10^4 \text{ К}$ зондирующий импульс создавался импульсным с $\tau \sim 10^{-8} \text{ с}$ лазером на алюминиевом гранате, дающим высокую ($T \sim 6 \sim 10^7 \text{ К}$) спектральную температуру и малую угловую расходимость светового потока. Лазерная система была снабжена затвором Поккельса с электронным управлением, позволяющим синхронизировать лазерное зондирование со взрывом. При диаметре фокального пятна $\sim 0.6 \text{ мм}$ удельная плотность мощности лазерного излучения на фронте ударной волны составляла $\sim 1 - 7 \cdot 10^5 \text{ Вт/см}^2$, что не приводит к существенному разогреву вещества за время измерений.

Измерениями охвачен диапазон давлений от 1.6 до 17 ГПа и плотностей от 0,5 до 4 г/см^3 , значительно превосходящей плотность ксенона в критической точке. В этих условиях реализуется сильно-разогретая с $T \sim 3 \cdot 10^4 \text{ К}$ неупорядоченная плазма со значительным кулоновским воздействием $\Gamma \sim 2 \div 7$. При этом рассчитанная в рамках кольцевого дебаевского приближения концентрация электронов на порядок превосходит критическое для $\lambda \sim 1.06 \text{ мкм}$ значения $n_{\text{кр}} \sim 10^{21} \text{ см}^{-3}$, а коэффициент отражения достигает 50% характерных для металлов. Сделанные оценки пространственной структуры фронта ударной волны, связанные с кинетикой ионизации и лучистым теплообменом, показали, что отражение излучения определяется именно резонансными свойствами электронов плазмы, что позволяет использовать эти измерения для анализа физических свойств сильнонеидеальной плазмы.

3.6 Изоэнтропическое расширение ударно-сжатых металлов

При анализе сверхскоростных соударений, взаимодействия мощных импульсов излучения с веществом и других подобных явлений необходимо рассчитывать состояния вещества в широкой области фазовой диаграммы. По этой причине для построения широкодиапазонных уравнений состояния, наиболее адекватно и точно описывающих реальные свойства вещества, привлекаются экспериментальные данные, полученные в разных областях фазовой диаграммы с использованием разной экспериментальной техники.

Измерения ударной сжимаемости дают сведения об уравнении состояния вещества в области высоких давлений и температур, в то время как область пониженных плотностей, где происходит плавление и испарение большинства металлов, оказывается недоступной. С применением стандартной техники теплофизических измерений при нормальном давлении и температуре до $\sim 2500\text{ K}$ для большого количества веществ получены сведения о теплоемкости, изотермической и адиабатической сжимаемости, температуре плавления и скачках энтропии и плотности при плавлении. До давлений $\sim 5\text{ ГПа}$ к настоящему времени определены кривые плавления металлов, а до 30 ГПа - их изотермическая сжимаемость.

Остается, однако, малоисследованной обширная и важная в практическом отношении часть фазовой диаграммы, соответствующая плотностям, промежуточным между твердофазной и газофазной, и высоким давлениям и температурам. Это область неидеальной по отношению к широкому спектру межчастичных взаимодействий плотной плазмы, характеризующаяся большим разнообразием и крайней сложностью описания происходящих здесь физических процессов и явлений. В этой области реализуется также плотная разогретая металлическая жидкость, по мере расширения которой происходят снятие вырождения электронной компоненты, рекомбинация, переход метал л-диэлектрик и переход в газовую или плазменную фазу. Сведения о свойствах металлов в этой области ограничены, по-существу, крайне

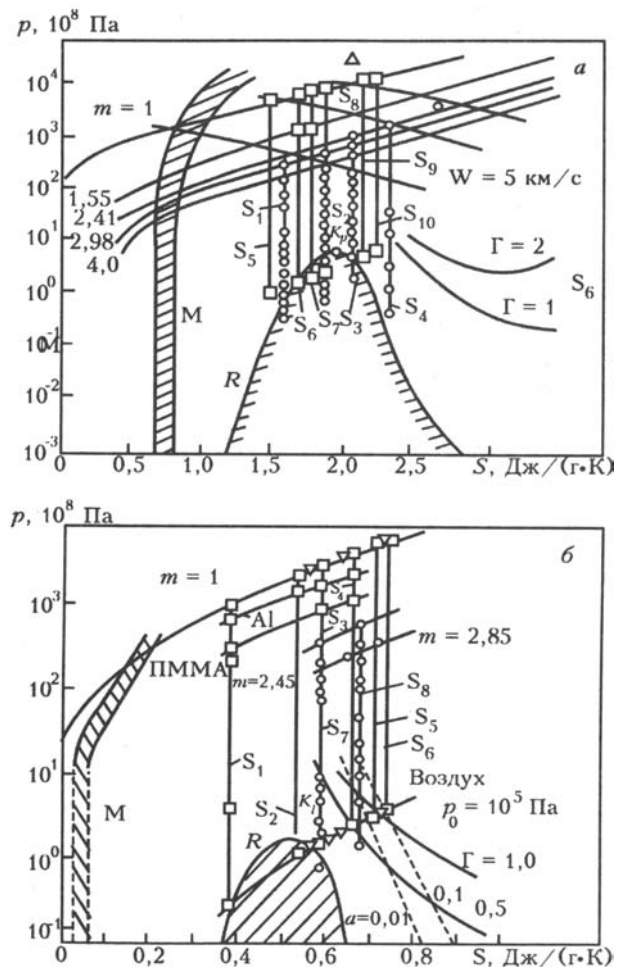


Рис. 3.18: Энтропийные диаграммы меди а) и висмута б): M, R - границы плавления и кипения, m -ударные адиабаты различной пористости, S - изоэнтропы расширения, W - кривые торможения железных ударников. На диаграмме (б) указаны адиабаты материалов, в которых осуществлялась разгрузка висмута. Точки - эксперименты [21], [17], [39], [64], [24].

малочисленными измерениями и полу эм-

Элемент	T_c, K	$p_c, 10^8 \text{ Па}$	$\rho_c, \text{ г/см}^3$	$S_c, \text{ кал/моль} \cdot K$
<i>Zr</i>	16250	7.52	1.79	40.45
<i>Zn</i>	3190	2.63	2.29	31.27
<i>V</i>	12500	10.78	1.86	37.26
<i>U</i>	11630	6.11	5.30	43.07
<i>W</i>	21010	15.83	5.87	43.34
<i>Ti</i>	11790	7.63	1.31	37.92
<i>Sn</i>	8200	3.35	2.05	39.44
<i>Ta</i>	14950	4.88	3.21	43.67
<i>Ag</i>	7010	4.50	2.93	36.86
<i>Re</i>	19600	15.70	6.32	43.42
<i>Po</i>	2050	0.62	2.67	37.52
<i>Pt</i>	14330	8.70	5.02	41.80
<i>Nb</i>	19040	12.52	2.59	41.65
<i>Ni</i>	10330	9.12	2.19	36.50
<i>Mo</i>	16140	12.63	3.18	41.21
<i>Bi</i>	4200	1.26	2.66	40.20
<i>Hg</i>	1763 ÷ 15	1.51 ÷ 0.025	4.2 ÷ 0.4	33.79
<i>Hg</i>	1753 ÷ 10	1.52 ÷ 0.01	5.7 ÷ 0.2	33.241
<i>Na</i>	2573	0.275	0.206	31.683
<i>K</i>	223	0.152	0.194	33.931
<i>Rb</i>	2093	0.159	0.346	36.485
<i>Cs</i>	2057 ÷ 40	0.144	0.428 ÷ 0.012	38.111
<i>Li</i>	3223	0.689	0.105	27.666
<i>Mn</i>	5940	6.28	2.46	35.68
<i>Mg</i>	3590	1.98	0.56	29.48
<i>Pb</i>	4980	1.84	3.25	39.81
<i>Fe</i>	9600	8.25	2.03	37.20
<i>Hf</i>	18270	9.38	3.88	42.59
<i>Au</i>	8970	6.10	5.68	39.40
<i>Ge</i>	9170	4.90	1.64	37.77
<i>Ga</i>	7210	4.31	1.77	35.91
<i>Cu</i>	8390	7.46	2.39	35.30
<i>Co</i>	10460	9.23	2.20	37.12
<i>Cr</i>	9620	9.68	2.22	37.35
<i>Ca</i>	4180	1.21	0.49	32.70
<i>Cd</i>	2790	1.60	2.74	33.20
<i>Be</i>	8080	11.70	0.55	27.02
<i>Ba</i>	4100	0.81	1.15	37.06
<i>Al</i>	8000	4.47	0.64	33.52
<i>Sb</i>	2570	1.30	2.61	36.10
<i>B</i>	8200	9.57	0.69	28.90
<i>Se</i>	1010	0.37	1.60	31.80
<i>S</i>	730	0.30	0.72	27.7

Таблица 3.2: Критические параметры металлов

пирическими оценками. Достаточно отметить, что из более чем 80 металлов периодической системы параметры критической точки надежно определены только для трех наиболее легкокипящих [147].

В область пониженных плотностей и высоких давлений плазмы позволяет продвинуться метод изоэнтропического расширения [18], [128], [95], [17], основанный на измерениях состояний вещества при его разгрузке после ударного сжатия. Для того, чтобы получить представление о характерных значениях температуры и давления, где необходимо проводить измерения, в табл.3.6 представлены результаты оценок [147] параметров критической точки ряда металлов. Оценки выполнены на основе принципа термодинамического подобия. Корректность такого способа оценки проверена на примере щелочных металлов и ртути, для которых параметры критических точек ранее были измерены теплофизическими методами.

Ввиду коллективизации валентных электронов, энергии связи, а следовательно, и параметры критических точек у металлов являются чрезвычайно высокими. Критические температуры металлов во многих случаях оказываются сравнимыми с их потенциалами ионизации, которые в плазме значительно понижены вследствие сильного взаимодействия зарядов между собой и нейтральными частицами. По этой причине пары металлов с параметрами, соответствующими правой ветви бинодали, находятся в термически ионизованном состоянии. Иными словами, высокотемпературное испарение металлов соответствует переходу непосредственно в сильнонеидеальное плазменное состояние, минуя область ионизованного газа. Это обстоятельство может отразиться на кинетике высокотемпературных фазовых переходов [131], а также резко исказить привычный вид фазовой диаграммы вещества, приводя к появлению дополнительных областей фазового расслоения и новых экзотических фазовых переходов.

Оценки параметров ударного сжатия металлов, необходимых для того, чтобы при изоэнтропической разгрузке вещество попадало в область испарения и окрестность критической точки, выполнены в работе [94]. Область плотностей, промежуточных между твердым телом и идеальным газом, характеризуется очень большой неопределенностью теоретических предсказаний, что не позволило провести прямые вычисления изоэнтроп. Поэтому для оценок был использован энтропийный критерий [69], основанный на изоэнтропичности течения в волне разгрузки. Необходимые параметры ударных волн рассчитывались путем сопоставления табличных значений энтропии фазовых превращений и оценок ее величины в критической точке с энтропией конденсированной фазы металла на его ударной адиабате. Наиболее подробные расчеты выполнены для алюминия, никеля, меди и свинца, для которых имеются достаточно полные уравнения состояния [88]. Результаты для меди и висмута приведены на рис. 3.18 и в табл.3.6. Для других металлов оценки давления в ударных волнах, необходимого для фазовых превращений при разгрузке, проведены с использованием уравнения состояния из [121]. Результаты представлены на рис. 3.19. Расчеты показывают, что состояния металлов вблизи линии равновесия жидкость - пар вполне достижимы в лабораторных условиях путем ударного сжатия конденсированного вещества и его последующей разгрузки. Однако, для достижения закритических условий в волне разгрузки требуются генераторы ударных волн чрезвычайно высокой интенсивности, лежащей на грани энергетических возможностей химических ВВ [1]. Необходимые амплитуды ударных волн могут быть существенно понижены применением пористых образцов, чем обеспечивается дополнительный прирост энтропии

Параметр	Ni		Al		Cu		Pb	
Пористость m	1	3	1	3	1	4	1	2
$P_{исп}$	3.8	0.3	1.7	0.2	2.7	0.2	0.7	0.1
$P_{кр}$	7.3	0.5	4.4	0.5	7.5	0.7	1.9	0.4
$P_{конд}$	20	1.9	10	2.7	20	3.9	5.0	1.3

Таблица 3.3: Давления на ударных адиабатах (в 0.1 ТПа) металлов различной пористости m , приводящие к испарению, конденсации и достижению околоскритических состояний

ударного сжатия [69].

Немногочисленные пока измерения расширения ударно-сжатых конденсированных веществ можно разделить на две группы по характеру получаемой в них физической информации. Первая группа опытов [17], [142], [171], [179], [138] основана на определении энтропии ударного сжатия твердых тел путем регистрации только конечных параметров вещества после разгрузки. В экспериментах второй группы [18], [128], [95], [39] проводились подробные измерения изоэнтроп разгрузки во всей промежуточной области параметров от твердого тела до плазмы или газа.

Измерения ударной сжимаемости дают возможность определить только калорическое уравнение состояния, не содержащее таких важных характеристик вещества, как температура или энтропия. Что касается измерений температуры, то для металлов они возможны пока только для разгруженных состояний. По результатам этих измерений может быть надежно вычислено остаточное значение энтропии после разгрузки, а поскольку процесс разгрузки является изоэнтропичным, то тем самым определяется значение энтропии и на ударной адиабате.

В случае ударных волн умеренной интенсивности конечные состояния оказываются в твердой или жидкой фазе, что позволило использовать [65] фотоэлектрический метод измерения остаточной температуры и на этой основе найти [146] энтропию и температуру меди при давлениях до 190 ГПа. В [207] энтропию натрия, стронция, бария и урана находили путем оптических измерений доли испарившегося металла

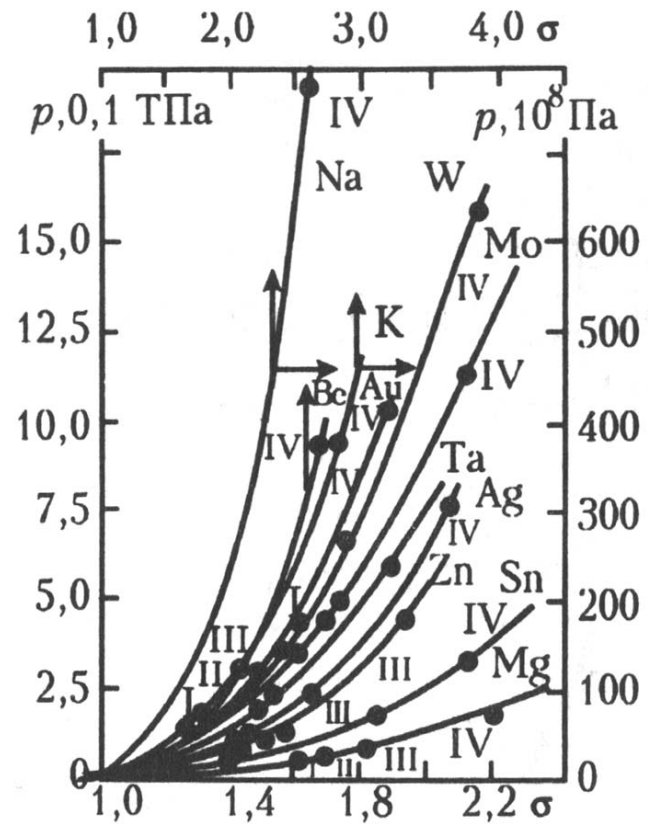


Рис. 3.19: Интенсивности ударных волн, вызывающих фазовые переходы в волнах разгрузки. Плавление: I - начало, II - конец, III - начало испарения, IV - достижение критической точки, $a = \rho/\rho_0$ - степень сжатия вещества.

под действием ударных волн с давлениями $\sim 20 - 300$ ГПа. Поскольку ударные волны столь умеренных интенсивностей приводят лишь к незначительному испарению, которое может быть зарегистрировано лишь при чрезвычайно низких давлениях, эти измерения проведены в вакууме $\sim 10^{-5}$ ммрт.ст. Адсорбционные измерения, выполненные в условиях существенной неоднородности течения, позволили найти [207] долю конденсата, образовавшегося при охлаждении плазмы в процессе ее расширения из ударно-сжатого состояния. На основе качественных соображений о кинетике процесса испарения и конденсации результаты этих измерений были связаны с энтропией ударно-сжатого вещества.

В серии последующих работ общие представления об испарении и ионизации в волне разгрузки были использованы для анализа высокоскоростного соударения твердых тел и для создания флюоресцирующих бариевых облаков в космическом пространстве в целях изучения магнитосферы Земли [146].

Измерения скорости расширения свинца после прохождения по нему ударных волн с давлением от 40 до 300 ГПа использовались [17] для анализа его испарения. Известно, что, если после ударного сжатия и разгрузки образец остается в конденсированной фазе, то скорость его свободной тыльной поверхности после выхода на нее фронта ударной волны лишь незначительно отличается от удвоенной величины массовой скорости на ударном скачке. Зарегистрированное в [17] отклонение от этого правила удвоения скоростей явилось экспериментальным свидетельством испарения при разгрузке.

В [65] была предпринята попытка дополнить данные по сжимаемости измерениями температуры свинца при его изэнтропическом расширении в окрестности кривой кипения. Степень расширения ударно-сжатого свинца в отраженной волне разрежения и давление в конце разгрузки варьировались применением преград с разной динамической жесткостью, располагаемых по ходу волны вслед за образцом. Для измерений в области кривой кипения в качестве преград использовался гелий с различным начальным давлением. Гелий оставался прозрачным в ударно-сжатом состоянии и пропускал тепловое излучение образца свинца. Это излучение регистрировалось скоростные двухканальным пирометром, что позволяло определить яркостную температуру.

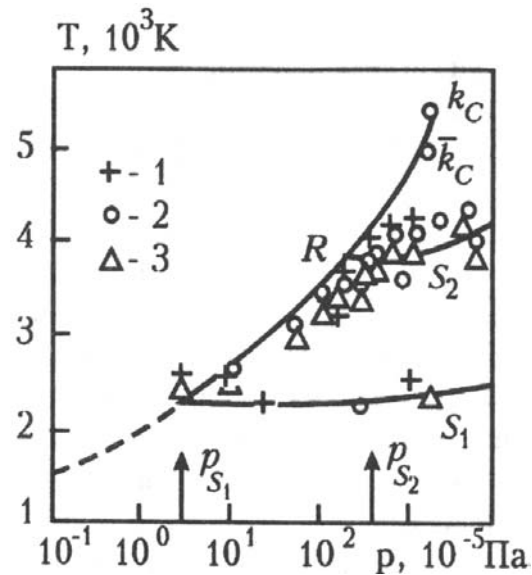


Рис. 3.20: Температурные измерения при адиабатическом расширении свинца: Сплошные кривые - расчет по полуэмпирическому уравнению состояния кривой кипения R , критической точки K_c и изэнтроп разгрузки S , штриховая линия - статические данные по кривой кипения, K_0 - оценки параметров критической точки из [94]. Точки - результаты регистрации температуры фотодиодами (1) и двухканальным пирометром: $\lambda_1 = 449$ нм (2), $\lambda_2 = 560$ нм (3). $p_{S_1} = 3 \cdot 10^5$ Па, $p_{S_2} = 4.2 \cdot 10^7$ Па - давление на изэнтропах при их вхождении в двухфазную область.

Проведены измерения при давлении ударного сжатия свинца до ~ 600 ГПа. Результаты опытов представлены на рис. 3.20, где переход изоэнтропы из однофазного состояния (степенная зависимость температуры от давления) в область смеси фаз (экспоненциальная зависимость) выражается в резком изменении наклона кривых S и R . Равновесность исследуемых состояний свинца после ударного сжатия и разгрузки подтверждается тем, что состояния в двухфазной области, полученные расширением от разных исходных давлений (160 ГПа и 240 ГПа), в полном соответствии с правилом фаз Гиббса согласно измерениям имеют одинаковые значения температуры. Эта равновесность, по-видимому, нарушается при давлении ниже 3 МПа, где измеренные значения температуры оказались выше кривой насыщения. Причина превышения связана с кинетикой испарения и конденсации металлов [173]. Таким образом, данные эксперименты позволили с достаточной определенностью зафиксировать начало испарения металла при вхождении изоэнтропы в двухфазную область и определить кривую кипения свинца в диапазоне давлений от 5 до 100 МПа. Эксперименты [65], как и более ранние измерения сжимаемости [18], [128], [95], [17], [39], свидетельствуют об отсутствии термодинамических аномалий, которые можно было бы связать с фазовыми переходами в плотной плазме. Разлет в вакуум образцов пористого алюминия, меди и полиметилметакрилата при отражении мощных ударных волн от свободной поверхности исследовался в работах [179], [138]. В этих экспериментах регистрировался удар испаренного вещества о конденсированную преграду. Измеренные профили скорости поверхности соударения анализировались сопоставлением с результатами численного моделирования экспериментов, выполненного на основе различных уравнений состояния. отрицательным, так же как и внутри спинодали. Кинетика снятия неравновесности в этом случае является безактивационной, определяется главным образом теплопередачей и допускает в условиях эксперимента, как показали оценки, лишь ничтожные пересыщения, не превосходящие нескольких градусов [131].

В исследованиях фазовых переходов в ударных волнах всегда важен вопрос о равновесности измеряемых состояний и процессов. Очевидно, что локальное термодинамическое равновесие может достигаться только в том случае, если время фазового перехода значительно меньше характерной длительности эксперимента, составляющей в данном случае $\sim 10^7$ с. В связи с этим любопытно отметить, что в экспериментах с ударными волнами можно надеяться реализовать уникальную возможность проникновения в область абсолютной неустойчивости двухфазной системы, где $(\partial p/\partial V)_T > 0$ [131]. В критической точке, где $(\partial p/\partial V)_T = 0$, значение $(\partial p/\partial V)_S$ остается отрицательным, так же как и внутри спинодали. Кинетика снятия неравновесности в этом случае является безактивационной, определяется главным образом теплопередачей и допускает в условиях эксперимента, как показали оценки, лишь ничтожные пересыщения, не превосходящие нескольких градусов [131].

Анализ кинетики распада металлической метастабильной жидкости показал [131], что высокие значения критических температур, сравнимые с соответствующими потенциалами ионизации, приводят к заметной термической ионизации металлического пара на бинадали. Вследствие этого метастабильная фаза должна содержать большое количество зарядов, которые являются эффективными центрами кипения и конденсации. Поскольку скорость фазового перехода пропорциональна числу зародышей новой фазы, время превращения в этих условиях оказывается весьма малым - порядка 10^{-9} с. Следовательно, можно говорить о наличии локальной равновеснос-

ти в ударно-волновых экспериментах с испарением металлов в вакуум [171], [179], [138] и разгрузкой ударно-сжатого свинца в воздух [95] и гелий [65]. По оценкам [131], заметной неравновесности можно ожидать только при давлениях ниже 1 МПа, что, видимо, и определяет нижний предел применимости метода изоэнтропического расширения в термодинамике. Данные измерений, по-видимому, подтверждают эту точку зрения, свидетельствуя о квазиравновесном характере высокотемпературной конденсации металлов.

Отметим еще ряд работ по изучению разлета вещества после прохождения по нему мощных ударных волн [142], [146], [207]. В [142] получены две точки на адиабатах расширения плазмы урана и меди в воздух атмосферного давления. На основе этих данных сделана корректировка полуэмпирического уравнения состояния. Результаты по отражению от мягких преград ударных волн в пористой меди представлены в [11], где авторов интересовали главным образом вопросы двухфазной газодинамики.

Во второй группе экспериментов [18], [128], [39], [65], [64], [6] методом преград проводились измерения не только конечных, но и промежуточных состояний, на изоэнтропе плазмы. С этой целью измерялись параметры ударных волн в преградах с различными динамическими импедансами, располагаемых по ходу волны непосредственно за образцом. Тем самым определены изоэнтропы расширения исследуемых ударно-сжатых веществ в координатах p, u . Переход от измеренных давления и массовой скорости на римановой траектории разгрузки к термодинамическим переменным p, V, U осуществлен вычислением интегралов Римана.

В [207] с этим методом зарегистрированы три изоэнтропы расширения ударно-сжатого урана. Измерения выполнены главным образом для жидкой фазы, в то время как наиболее интересная окрестность критической точки, двухфазная и плазменная области оказались не изученными, что заставило авторов [207] для описания хода изоэнтроп в области пониженных давлений ограничиться качественными оценками. В серии работ [18], [39], [64], [6], [24] проведено систематическое изучение адиабатического расширения свинца, меди, алюминия и висмута. Для расширения энтропийного диапазона эксперименты проведены как со сплошными, так и с высокопористыми образцами. Особое внимание уделялось плазменной области параметров, измерения в которой проведены при использовании в качестве преград сжатых газов с начальным давлением 0,1- 5 МПа. Для измерений при более высоких давлениях в качестве преград с малым динамическим импедансом использовались легкие металлы (Al, Mg), полимеры и пенопласты.

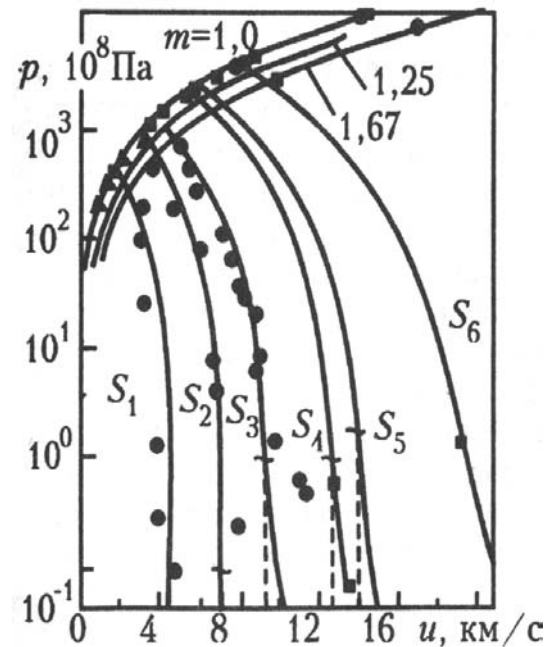


Рис. 3.21: $p - u$ диаграмма свинца [17]: m - ударные адиабаты различной пористости, S - изоэнтропы расширения, штриховые линии - метастабильные ветви, точки - эксперимент.

Для увеличения "энтропийного" диапазона состояний, достижимых в результате ударного сжатия и изоэнтропической разгрузки металлов в лабораторных экспериментах, разрабатываются сложные взрывные устройства, в которых реализуются различные принципы кумуляции ударных волн. Так для экспериментов с ураном в [207] применялись устройства со сферической сходящейся детонационной волной.

В работах [39], [64], [42] существенный прирост скорости метания плоских металлических ударников получен в каскадных устройствах, идея которых заключается в следующем. Если жестким ударником со скоростью u_1 возбудить ударную волну в пластине из материала с малой динамической жесткостью ρc , то после отражения волны от свободной тыльной поверхности пластины последняя приобретает скорость u_2 , значительно превышающую скорость ударника. Если же на поверхности этой легкосжимаемой буферной пластины размещен тонкий слой металла с высокой динамической жесткостью, то, в результате многократных отражений волн, он должен в итоге приобрести ту же самую скорость u_2 или близкую к ней. Таким образом, можно, в принципе, увеличить скорость соударения жесткого ударника с исследуемым образцом и тем самым увеличить давление и энтропию его ударного сжатия. Отношение u_2/u_1 определяется соотношением динамических импедансов материалов и в любом случае не превышает 2. Ясно, что прирост скорости второго ударника можно получить только в том случае, если длительность действия высокого давления в мягкой буферной пластине достаточно велика, чтобы в процессе многократных отражений волн внутри второго ударника его скорость успела приблизиться к u_2 . Иными словами, толщина второго ударника должна быть много меньше толщины первого. Вторым обстоятельством, которое необходимо учитывать при отработке подобных устройств, является возможность плавления метаемого слоя в результате роста энтропии в повторяющихся циклах ударного сжатия и разгрузки.

В результате оптимизационных расчетов и многочисленных экспериментов были созданы двух- и трехкаскадные метательные устройства различной конструкции. В качестве материала буферной пластины обычно используется оргстекло или мощное взрывчатое вещество. С применением таких многокаскадных устройств для плоских молибденовых ударников толщиной 0.1-0.2 мм удалось достичь скорости метания 13 км/с при скорости первого стального ударника около 6 км/с.

Наряду с многокаскадными устройствами были выполнены также эксперименты

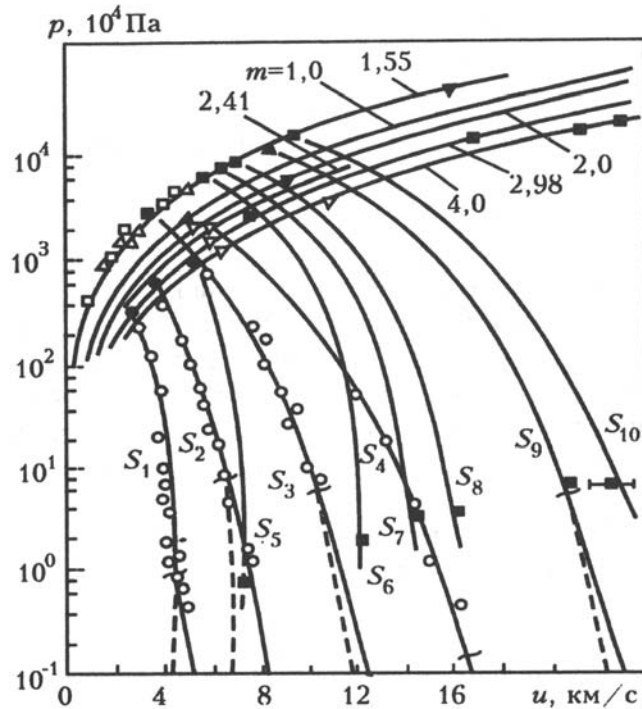


Рис. 3.22: $p - u$ диаграмма меди [64]. Обозначения см. на рис. 3.21.

с применением взрывных конических генераторов маховских ударных волн [64]. Энтропийные диаграммы на рис. 3.18, 3.21, 3.22 демонстрируют диапазон параметров состояния меди, висмута и свинца, изученных в экспериментах с ударными волнами. В частности, для висмута экспериментами охвачен широкий диапазон состояний от сильносжатого вещества на ударной адиабате с $p \sim 670 \text{ ГПа}$, $\rho \sim 2.6\rho_0$ до разреженного металлического пара с $\rho \sim 10^{-2}\rho_0$. Таким образом, современная экспериментальная техника позволяет путем регистрации мощных ударных волн и волн разрежения в металлических образцах единым методом проводить исследования разнообразных состояний вещества - от сильносжатой металлической плазмы, где ионы разупорядочены, а электроны вырождены, до квазинеидеальной больцмановской плазмы и разреженного металлического пара. По мере расширения в системе происходят многообразные малоизученные физические процессы - снимается вырождение электронов, коренным образом перестраивается электронный энергетический спектр, осуществляется частичная рекомбинация плотной плазмы, реализуется переход металл-диэлектрик в электронной неупорядоченной структуре и возникает неидеальная по отношению к различным видам межчастичного взаимодействия плазма. Полученные результаты дали возможность впервые объединить участки фазовой диаграммы, соответствующие радикально отличающимся физическим состояниям [147].

Наличие сильного коллективного взаимодействия затрудняет последовательное теоретическое описание вещества в этом диапазоне параметров, и здесь предложен ряд эвристических моделей, описывающих отдельные эффекты в относительно узких частях фазовой диаграммы. Основным качественным результатом большинства моделей является указание на возможность потери термодинамической устойчивости и расслоения сильнонеидеальной плазмы на новые экзотические фазы, что существенно искажило бы привычный вид фазовой диаграммы металлов. Проведенные эксперименты показали отсутствие заметных скачков термодинамических функций или каких-либо гидродинамических аномалий, которые можно было бы интерпретировать как специфические плазменные фазовые превращения. Подчеркнем, что обсуждаемые в литературе плазменные фазовые переходы наиболее вероятны именно в исследованном диапазоне параметров, так как увеличение температуры и уменьшение плотности больцмановской плазмы, а также увеличение давления вырожденной плазмы приводит к относительному уменьшению эффектов неидеальности. К такому же выводу относительно плазменных фазовых переходов пришли недавно и американские исследователи [179], [138].

Наибольшие стадии расширения плазмы металлов соответствуют реализации околокритических состояний. Вхождение изоэнтроп в двухфазную область жидкость-пар со стороны жидкой фазы сопровождается испарением, а со стороны газовой фазы - конденсацией. Наличие этих изломов на экспериментальных кривых рис. 3.21, 3.22 и их соответствие априорным оценкам эффектов испарения [147], [131], а также результаты оптических измерений являются дополнительным свидетельством равновесности процесса двухфазного расширения. Из выполненных экспериментов следует, что фазовые диаграммы меди и свинца в исследованной их части имеют обычный вид с одной критической точкой фазового перехода жидкость-пар.

Опытные данные по ударному сжатию и изоэнтропическому расширению явились основой для построения широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния [147], [17], [44].

3.7 Уравнения состояния при сверхвысоких давлениях

По существующим сейчас представлениям [68], [86] свойства плазмы радикальным образом упрощаются при экстремально высоких давлениях и плотностях где применима модель Томаса-Ферми и ее модификации. Нижняя граница применимости модели Томаса-Ферми $p_{гр} \sim e^2/a_0^4$, соответствует давлениям ~ 30 ТПа, которые значительно превосходят возможности экспериментальных устройств, основанных на использовании химических взрывчатых веществ и баллистических установок. Поэтому в настоящее время активно ведется поиск альтернативных способов генерации сверхвысоких параметров состояния вещества. Проводятся ударно-волновые эксперименты с использованием ядерных взрывов [16], [119], [120], [113], [1], [46], [203], [44], [47], [2], [48], [104], [62], релятивистских электронных и ионных пучков, электровзрыв металлических фольг и т.д. Последние из перечисленных методов сейчас находятся лишь в стадии развития. В опытах же с сильными взрывами уже проведены уникальные измерения сжимаемости веществ при рекордно высоких давлениях.

Очевидно, что очень сложные и дорогостоящие опыты с ядерными взрывами целесообразно проводить для решения ключевых физических проблем. Наиболее яркой из таких проблем в последние годы стал вопрос о влиянии оболочечной электронной структуры атомов на термодинамические свойства плотных веществ [1]. Оболочечные эффекты проявляются в осциллирующем поведении термодинамических функций (например, ударных адиабат, изохор). Это, в свою очередь, может обуславливать существование областей аномальной сжимаемости, в которых $(\partial^2 p / \partial V^2)_S < 0$, что должно привести, в частности, к образованию ударных волн разрежения. Учет таких свойств реальных веществ в расчетах интенсивный импульсных воздействий потребовал бы модификации алгоритмов, на которых основаны современные программы математического моделирования гидродинамических процессов [44]. Это обстоятельство дополнительно подогревает интерес к оболочечным эффектам.

Как известно, для измерения ударной сжимаемости нужно определить из экс-

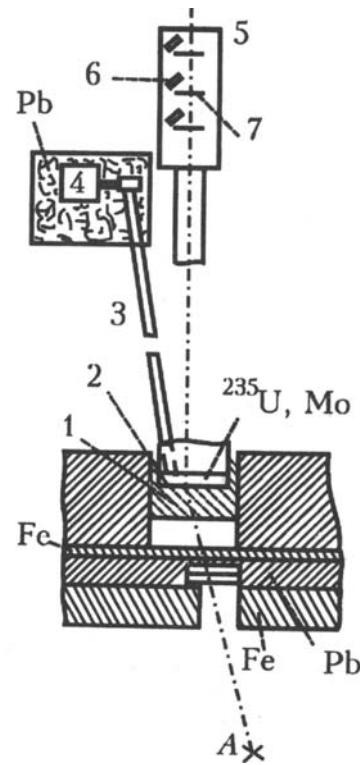


Рис. 3.23: Схема опытов по генерации мощных ударных волн с помощью подземного ядерного взрыва [203]. А - ядерное устройство, 1 - поглотитель нейтронов B_4C , 2 - экспериментальная сборка из урана-235 и молибдена, световоды (длина 12 м), 4 - регистраторы оптического излучения, 5 - время пролетный нейтронный спектрометр, 6 - твердотельные детекторы, 7 - фольги из лития и плутония.

перимента два параметра ударной волны, обычно - скорость волны D и скорость вещества за ударным фронтом u . Измерение D не вызывает принципиальных затруднений. Величина и в лабораторных опытах с пушками и химическими взрывчатыми веществами может быть измерена как относительным, так и абсолютным способом. Если в эксперименте организовано соударение пластин из одного и того же материала, то достаточно измерить скорость ударника, чтобы определить величину массовой скорости за фронтом ударной волны в мишени, которая точно равна половине скорости ударника. Относительные измерения проводятся методом отражения, для чего измеряются скорости ударных волн в экране из эталонного материала, через который ударная волна вводится в исследуемый образец, и в самом образце. Анализ распада разрыва на границе между экраном и образцом с использованием уравнения состояния материала экрана позволяет по измеренным значениям волновых скоростей найти все остальные параметры ударной волны в образце. Очевидно, что точность таких измерений определяется той точностью, с которой известно уравнение состояния материала экрана.

К сожалению, невозможно использовать энергию ядерного взрыва для организации симметричного соударения пластин. Энергия взрыва столь велика, что ударник неизбежно будет испарен. По этой причине подавляющее большинство измерений в этих условиях выполнено методом отражения. Ясно, что такой метод содержит неопределенность, связанную с экстраполяционной процедурой построения ударной адиабаты эталона как раз в той области параметров, где необходимо выполнить измерения.

Американские исследователи предложили [203] схему абсолютных измерений массовой скорости в условиях ядерного взрыва, которая основана на регистрации доплеровского сдвига резонансов взаимодействия нейтронов с ядрами движущегося вещества по отношению к их положению у покоящихся ядер. Схема этих опытов показана на рис. 3.23. Ударная волна создавалась в урановом экране в результате деления его ядер под воздействием потока нейтронов, образующихся при ядерном взрыве. Для этого на расстоянии 1.1 м от ядерного заряда помещался докритический блок из урана-235, экранированный от взрыва поглотителем медленных нейтронов из карбида бора. На поверхности уранового блока был смонтирован исследуемый молибденовый образец с установленными в нем световодами для измерения скорости движения фронта ударной волны. Нейтронный поток, возникающий при взрыве ядерного устройства, вызывает быстрый и равномерный нагрев урана приблизительно до 50 эВ, который сопровождается соответствующим возрастанием давления. В результате распада разрыва в молибденовом образце создается плоская ударная волна с давлением 2 ТПа. В опыте измерялась скорость фронта ударной волны и, с помощью пролетного спектрометра, регистрировались резонансные линии нейтронного поглощения в диапазоне энергий 0.3 - 0.8 кэВ, по доплеровскому сдвигу которых определялось значение скорости вещества.

Существенное значение для реализации этой идеи имела величина поток нейтронов в резонансной области энергий $10 - 10^3$ эВ. Количество таких нейтронов в делительном спектре весьма мало. Для увеличения их между ураном и образцом в [107] помещался тонкий слой водородосодержащего вещества - оргстекла. Это позволило повысить нейтронный поток на границе примерно на порядок.

Молибден в дальнейшем [2] был использован в качестве эталона в экспериментах с измерением сжимаемости урана относительным методом при давлении около

6.7 ТПа. Отметим, что при обработке этих данных авторам этой работы пришлось прибегнуть к достаточно далекой (от $p \sim 2.0$ ТПа до $p \sim 5$ ТПа) экстраполяции эталонной адиабаты молибдена.

В работе [113] для абсолютных измерений массовой скорости за фронтом ударной волны в алюминии использовались излучающие реперы - тонкие пластины из европия, обладающего аномально большим сечением радиационного захвата, которые размещались внутри исследуемого образца и вовлекались в движение вместе с окружающим их веществом. Под действием нейтронов ядерного взрыва реперы начинали испускать γ -излучение. Это излучение регистрировалось сцинтилляционными датчиками, которые были расположены в нескольких параллельных щелевых коллиматорах, как это показано на рис. 3.24. Таким образом регистрировались моменты пересечения реперами плоскостей коллиматоров. Расстояние между коллиматорами является базой измерения скорости.

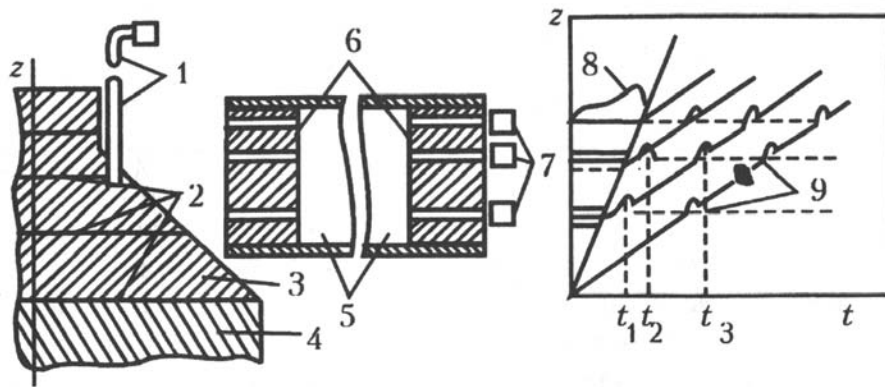


Рис. 3.24: Схема опытов по абсолютной фиксации ударной сжимаемости алюминия [113]: 1 - оптический канал, 2 - реперные слои, 3 - исследуемое вещество, 4 - канал формирования ударной волны, 5 - коллимирующая система, 6 - коллимирующие щели, 7 - детекторы γ -излучения, 8, 9 - сигналы излучения неподвижного и движущегося репера.

Основная масса измерений в области сверхвысоких давлений, количество которых, в общем, невелико, выполнена сравнительным методом. В качестве эталона использовались свинец [16], [119] и железо [48], для которых строились интерполяционные ударные адиабаты, связывающие область сверхвысоких ($p \sim 10$ ТПа) давлений с доступным для абсолютных измерений диапазоном давлений до 1 ТПа. Полученные результаты могут быть использованы для проверки моделей уравнения состояния, но ответа на вопрос о влиянии оболочечной структуры они не дают, поскольку измерения проведены ниже границы проявления оболочечных эффектов. Приближение измерений к центру ядерного взрыва позволило еще выше поднять потолок достижимых давлений, доведя его до ~ 400 ТПа, однако из-за значительного затухания ударной волны в образцах и нарушения одномерности ударного сжатия погрешность измерений оказалась слишком высокой.

Наиболее явно вклад оболочечных эффектов был зафиксирован в [210]. В экспериментальных сборках возбуждались ударные волны с хорошо определенной формой фронта, измерения проводились в единой постановке при нескольких значениях давления на фронте волны. Очень тщательно был проработан способ измерения скорости ударной волны. Эта задача далеко не тривиальна, если учесть необходимость точного

измерения весьма малых интервалов времени при большом удалении регистрирующей аппаратуры и в условиях мощных электромагнитных и иных помех, излучаемых взрывом. Моменты выхода фронта волны на контрольные поверхности фиксировались по возникновению свечения воздуха. Для дистанционных измерений использовались быстродействующие коаксиальные фотоэлементы, установленные на конце металлических световодов таким образом, чтобы в поле зрения каждого фотоэлемента находились три контрольные поверхности сборки: две - эталонного экрана, одна - образца. Измерялись не только скорость, но и затухание волны. Измерения проведены для следующих пар материалов: железо-алюминий, свинец-железо, железо-вода, железо-кварцит. В работе [1] надежно были зафиксированы оболочечные эффекты на ударных адиабатах в свинце и алюминии.

3.8 Перспективные генераторы мощных ударных волн

Стремление к продвижению в область недоступных ранее параметров и организации ударно-волновых исследований в условиях обычной физической лаборатории побуждают к использованию новых способов импульсного воздействия на вещество. В качестве перспективных источников высоких динамических давлений рассматриваются электровзрывные и электродинамические устройства, импульсные лазеры большой мощности, сильноточные импульсные ускорители ионных и электронных пучков которые создавались для целей инерционного управляемого термоядерного синтеза и технологических приложений.

Большинство такого рода физических экспериментов выполнено с импульсными лазерами [22]. Высокая концентрация энергии достигается при фокусировке излучения на малые ($\sim 10^{-4} \text{ см}^2$) поверхности. Достигнутые в настоящее время удельные мощности, вкладываемые в мишени, составляют $\sim 10^{14} - 10^{17} \text{ Вт/см}^2$ и в ближайшем будущем могут быть, по-видимому, доведены до 10^{21} Вт/см^2 . Под действием интенсивного излучения поверхностный слой мишени испаряется, а возникающий при этом импульс отдачи генерирует в мишени ударную волну. Анализ [212] гидродинамических расчетов ударных волн, возникающих при воздействии лазерных систем с длиной волны $\lambda \sim 1.06 \text{ мкм}$

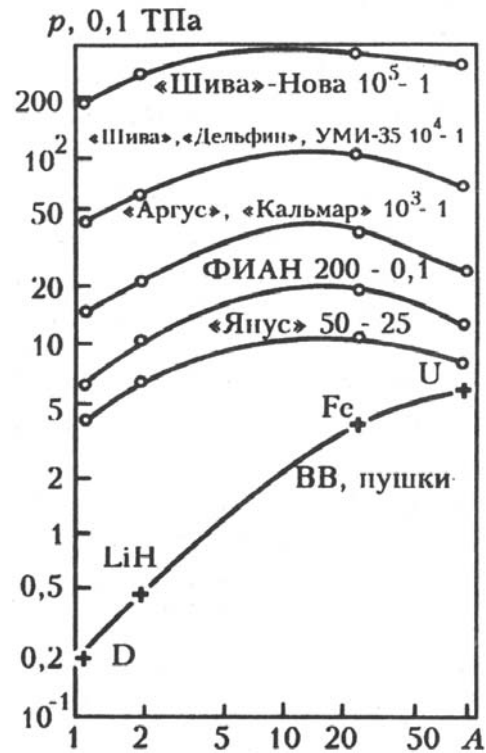


Рис. 3.25: Максимальные давления плазмы, генерируемые различными лазерными системами [212]. Первая цифра - энергия в джоулях, вторая - время импульса в 10^{-9} с , нижняя кривая - доступные для техники химических ВВ и легкогазовых пушек параметры, A - атомный номер элемента мишени.

на разные материалы, показывает, что в этом случае имеется реальная возможность продвинуться в ультрамегабарный диапазон давлений (рис. 3.25). Значительными преимуществами обладает коротковолновое лазерное излучение благодаря большой эффективности его поглощения плазмой и меньшей роли нетепловых электронов.

Высокие динамические давления создаются импульсами излучения с нано- и субнаносекундной длительностью, поэтому все измерения нужно проводить в очень тонких мишенях, толщина которых не превышает нескольких десятков микрометров. При конструировании лазерных мишеней для таких экспериментов [21], [212], [170] учитывается влияние нетепловых электронов, возникающих в зоне резонансного поглощения лазерного излучения. Размер мишени должен быть достаточно мал, либо необходимо использовать специальные экраны для уменьшения роли поверхностных токов из разогретой плазмы.

Первые опыты по возбуждению ударных волн в водороде и плексигласе были выполнены с маломощным неодимовым лазером [208] с энергией ~ 12 Дж и длительностью импульса $\sim 5 \cdot 10^{-9}$ с. Ввиду малого размера фокального пятна (40 мкм) ударные волны быстро затухали и вырождались в сферические. Для получения плоских ударных волн в [216] использовалась более мощная лазерная система: $E \sim 30$ Дж, $\tau \sim 0.3 \cdot 10^{-9}$ с. Измеренная скорость фронта ударной волны в алюминии в этих опытах достигала 13 км/с, что соответствует давлению ~ 0.2 ТПа. Эти давления были увеличены [213] на порядок путем использования лазера с повышенными параметрами $E \sim 100$ Дж, $\tau \sim 0,3 \cdot 10^{-9}$ с, дающими на мишени интенсивность излучения $8 \cdot 10^{14} - 3 \cdot 10^{13}$ Вт/см². Здесь была использована мишень малого диаметра, уменьшающая, по мнению авторов, влияние поверхностных токов, и впервые в лазерных опытах получено соответствие теории и эксперимента [169], [161]. Давления $p \sim 3.5$ МПа получены на лазерной установке "Шива" [214] при облучении световым потоком с плотностью мощности $J \sim 3 \cdot 10^{15}$ Вт/см² составной мишени из алюминия и золота. В последующих работах [206] 10 лучей этой установки (энергия около 1 кДж, длительность импульса порядка 3 нс) разгоняли углеродную фольгу толщиной 10 мкм до скорости ~ 100 км/с, что создавало при ударе об углеродную мишень ударную волну с давлением около 2 ТПа. Тот же диапазон скоростей метания пластмассовых ударников был реализован в опытах с йодным лазером [37] при характерных плотностях мощности от 10^{12} до $6 \cdot 10^{15}$ Вт/см².

В опытах [216] для получения информации о массовой скорости движения плазмы использован метод отражения, при котором осуществлялся переход ударной волны из алюминия ($p \sim 0.3$ ТПа) в золото ($p \sim 0.6$ ТПа). Применение СО₂-лазера установки "Янус" [169] дало давление ударных волн в алюминии $\sim 5 \cdot 10^{11}$ Па при плотности мощности на слоистой мишени $J \sim 5 \cdot 10^{13} - 4 \cdot 10^4$ Вт/см². В конструкцию этой мишени был введен слой золота толщиной 1 мкм для поглощения нетепловых электронов, возникающих в плазме алюминиевого аблятора.

Пример использования нетепловых электронов для изохорного нагрева плазмы представлен в [202], где нетепловые электроны с энергией $E \sim 15$ кэВ вызвали большой нагрев и взрыв слоя алюминия толщиной 3 мкм, приводящего при своем расширении к генерации ударной волны с амплитудным давлением 1.3 ТПа.

Опыты с лазерными системами предъявляют чрезвычайно высокие требования к диагностической аппаратуре: временное и пространственное разрешение должно быть порядка 10^{-11} с и 10^{-4} см. Имеющаяся в настоящее время измерительная техника позволяет определить с удовлетворительной точностью скорость ударной вол-

ны в этих условиях, в то время как определение второго параметра ударного сжатия остается проблематичным. Рассматриваются самые разнообразные возможности: метод преград [216], [204], импульсная рентгенография [206], [165], доплеровский сдвиг уровней и т.п. (см. подробнее обзор [22]).

Значительный интерес в опытах с лазерными ударными волнами представляет изучение физических эффектов при выходе ударных волн на свободную поверхность [69]. Так, в [187] при помощи скоростного ЭОП анализировалось эмиссионное оптическое излучение тыльной стороны алюминиевой мишени после прохождения по ней ударной волны с давлением $\sim 0.03 - 1.2$ ТПа.

Интенсивность этого излучения была затем сопоставлена с температурой ударного сжатия в рамках, впрочем, чрезмерно упрощенной модели. Затем для сходных физических условий был измерен коэффициент отражения лазерного излучения длиной волны $\lambda \sim 0.57$ мкм от адиабатически расширяющейся плазмы [188], что дало информацию о высокочастотной электропроводности неидеальной плазмы $\rho \sim 1$ г/см³.

Мощные (около 10^{14} Вт) импульсные генераторы релятивистских электронов и ионов [206], [37] позволяют фокусировать корпускулярные пучки в области размером в несколько миллиметров. Вкладываемые таким образом удельные мощности $\sim 10^{14} - 10^{18}$ Вт/см² вызывают испарение и разлет внешней части мишени и возбуждают ударные волны в холодной части мишени. Характерная глубина поглощения электронов с энергией порядка МэВ в металлах составляет величину $\sim 0.1 - 1$ мм.

При достаточно быстром воздействии рост температуры происходит при практически постоянном объеме и сопровождается ростом давления. Данным способом достижимы давления мегабарного диапазона [9]. Близкий диапазон давлений реализуется и при воздействии ионных пучков [40], где фаза сжатия оказывается, однако, более короткой. В выполненных сейчас первых опытах по генерации ударных волн в металлах при помощи пучков релятивистских электронов [57], [10], [195] максимальные давления не превосходят 300 ГПа.

В последнее время все большее внимание уделяется схеме инициирования термоядерного синтеза ударом макроскопических лайнеров массой $\sim 0, 1$ г, разогнанных до скоростей 10^8 см/с [99]. Ясно, что рассматриваемые для этих целей высокоскоростные металлы устройства, основанные на электродинамических методах ускорения, могут быть использованы для генерации сверхмощных ударных волн и исследования с их помощью свойств плазмы при экстремальных давлениях и температурах. В одной из схем магнитодинамического ускорителя сверхпроводящий ударник разгоняется в неоднородном магнитном поле, создаваемом катушками, включение которых синхронизуется с движением ударника, а в другой схеме ускорение ударника осуществляется серией схлопывающихся к оси симметрии z -пинчей [99].

Перспективным способом продвижения по шкале давлений является электрический взрыв проводников. В [158] батарея конденсаторов емкостью ~ 15.6 Мф и напряжением 100 кВ сообщала тонкой алюминиевой фольге удельную энергию, превосходящую в 10-100 раз характерную внутреннюю энергию конденсированных ВВ.

Расширяясь, фольга сообщает пластмассовому ударнику толщиной 300 мкм скорость до 30 км/с и танталовому ударнику толщиной 30 мкм скорость до ~ 10 км/с. На этой установке выполнены измерения ударной сжимаемости тантала при давлениях 190 - 780 ГПа.

3.9 Относительные измерения ударных адиабат

Постановка измерений волновых скоростей в соприкасающихся образцах (метод преград, "относительные" измерения [69], [1]) зависят от диапазона исследуемых давлений. Способы возбуждения ударных волн разной интенсивности с заданной формой фронта волны хорошо известны специалистам. Выход волны на контрольные поверхности фиксируется по замыканию электрических контактов, по оптическому свечению прилегающих к образцам слоев воздуха, по свечению паров материала в волне разгрузки (см., например, [16], [118], [4], [47], [104]). У каждого способа регистрации своя область применения. Затухание ударной волны, необходимое для перехода от средних волновых скоростей к их значениям на контактной границе, надежно рассчитывается и, как правило, контролируется в опытах. Поправки, обусловленные прогревом вещества перед фронтом, например, электронами в экспериментах с лазерными импульсами [22] или гамма-квантами, вводятся на основании расчетов. Точность измерений определяется свойствами регистрирующей аппаратуры, характеристикой переходного тракта, знанием затухания волны внутри образцов и симметрией фронта волны относительно контрольных поверхностей.

Принципиальная возможность получения экспериментальной информации во всем интересном для приложений диапазоне давлений продемонстрирована в ряде работ советских и зарубежных исследователей [16], [118], [5], [47], [104], [198], [199], [200], однако не во всех случаях удалось использовать полученные результаты для калибровки моделей.

В экспериментах [16], [118] точность измерения временных интервалов составила 0.7-1.0%, затухание волны было на уровне 1-2%, что в совокупности обеспечило хорошую точность нахождения волновых скоростей на контактной границе. Эти результаты могут быть использованы для калибровки моделей, но ответа на вопрос о влиянии оболочечной структуры они не дают, измерения проведены вблизи нижней по давлению границы проявления оболочечных эффектов. Напомним, что в этом диапазоне давлений все модели предсказывают слабое влияние оболочек на поведение ударных адиабат, и расчетные $D - D$ -зависимости по ним - это отрезки прямых, разнесенных по оси ординат, с наклоном, очень слабо зависящим от выбора модели.

Примерно тот же диапазон давлений достигнут в измерениях африканских исследователей [198], [199], [200], в большинстве которых первым по ходу волны стоял молибден, точность определения волновых скоростей составила 1.4 - 2.6% в зависимости от образца, величина поправки на затухание не превышала 2%. Кроме этой поправку учтено было некоторое искривление фронта ударной волны в месте расположения экспериментальной сборки с плоскопараллельными контрольными поверхностями. Интерпретация измерений проводилась авторами методом $p - u$ -диаграмм. Анализ полученной информации в $D - D$ -координатах позволяет сделать дополнительные выводы. В частности, обращает внимание соотношение между расчетами и данными [198], [199]. Измеренные значения скоростей лежат по разные стороны от зависимостей, полученных по ТФПК, так что разница между ними вдвое меньше расчетной. Если это проявление оболочечной структуры, то положение осцилляции на ударных адиабатах свинца и урана и по амплитуде, и по расположению не объясняется ни одной из известных моделей и противоречит экспериментам [4]. Отметим, что малый объем информации и относительно небольшое изменение скорости в молибдене при переходе от измерений [199] к данным [200] не позволяет с нужной точностью

определить из экспериментов наклон зависимостей для пар молибден-алюминий и молибден-железо. Истинные значения скоростей скорее лежат в пределах объявленных допусков и не совпадают с номинальными экспериментальными значениями, так как углы для этих пар наклонов прямых, соединяющих точки, заметно отличаются от расчетных. Для этого в исследованной области давлений не видно ясных физических причин.

Новые идеи в постановке измерений, благодаря которым удалось продвинуться в область давлений ~ 100 Мбар, прошли опытную проверку в [5]. Однако худшая, чем ожидалась, погрешность измерений, основной вклад в которую внесла неопределенность в учете затухания волны внутри исследовательской сборки, не позволяет использовать полученные результаты для калибровки моделей. Переход от плоской системы в [5] к сферической в измерениях [47] позволил еще выше поднять величину экспериментально достижимых давлений. Однако такой переход привел к большему затуханию ударной волны в образцах, и неопределенность ее учета снова внесла основной вклад в суммарную погрешность измерений.

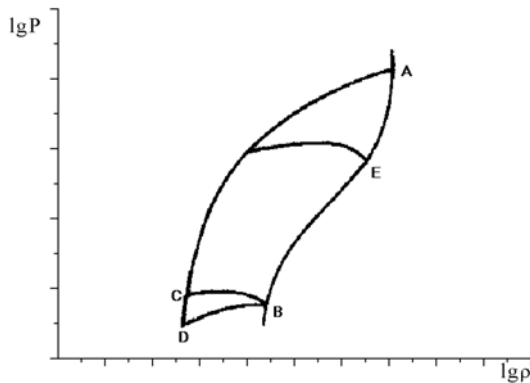


Рис. 3.26: Конфигурация области состояний, необходимой для моделирования задачи о точечном взрыве.

Нетрадиционные эксперименты по изучению влияния оболочечной структуры предприняли авторы работы [104]: найденные из опыта времена прохождения ударной волны по образцам из различных материалов сравнивались с расчетными. При прохождении образцов давление на фронте волны падало в три-четыре раза, т.е. при моделировании условий прохождения волны существенно знать не только участок ударной адиабаты, но и изоэнтропы разгрузки (см.рис. 3.26). Поэтому остается неясным, допускает ли однозначную интерпретацию такая постановка измерений. В конкретном

примере [104] объявленная погрешность измерений недостаточна для экспериментального обнаружения осцилляций.

После анализа результатов измерений [5], [47] были найдены пути достижения требуемой точности. Новые измерения были проведены в [4]. В исследовательских сборках возбуждались ударные волны с хорошо определенной формой фронта, измерения проводились в единой постановке при нескольких значениях давления на фронте волны. Базы измерений были выбраны так, чтобы поведение волновых скоростей внутри исследуемых слоев было по расчетам монотонным. Толщина опорного слоя составляла 2.5 см, толщина установленных на нем образцов была ~ 1 см. Параллельность слоев обеспечивалась конструкцией установки. Изготовление слоев веществ, входящих в состав сборок, тщательно контролировалось (например, высота микронеровностей на образцах не превышала 2.5 мкм), а их фактические плотность и толщина измерялись с высокой точностью.

Моменты выхода фронта волны на контрольные поверхности фиксировались по оптическому свечению прилегающих к ним слоев воздуха, которое передавалось к детектору типа ФЭК по световому каналу с полированными металлическими внут-

$T \cdot 10^{-3} K$	5	10	17	20	30	40	50
$B \cdot 10^{-3} K$	1.7	39.0	164.2	231.5	481.8	750.5	1027
$T \cdot 10^{-3} K$	60	70	80	90	100	150	
$B \cdot 10^{-3} K$	1308	1591	1876	2162	2448	3836	

Таблица 3.4: Зависимость величины B , Вт/м², от температуры воздуха для сурьмяно-циезиевого фотокатода

ренными стенками. Для обеспечения точности измерений в поле зрения одного ФЭК находились три контрольные поверхности, соответствующие выбранному давлению: одна - образца и две - эталона. Для экспериментального нахождения затухания волны ставились два слоя одинакового вещества. Взаимная подсветка контрольных поверхностей исключалась установкой внутри светового канала непрозрачных перегородок. В каждом световом канале устанавливалось по два детектора, и тот и другой записывали сигнал полностью. Сложность трехступенчатой формы сигнала предопределила применение осциллографической аппаратуры. Для повышения точности измерения временных интервалов использовалась схема регистрации, при которой рабочие сигналы записывались после хорошо известных задержек на короткие развертки. При считывании сигналов с осциллограмм широко использовались возможности современных ЭВМ и соответствующие математические программы обработки. Ток на детекторе можно рассчитать по формуле $I = B(T)\chi(SF/R^2)f$.

Здесь I - ток (А), χ - чувствительность фотоэлемента к к видимому свету, мкА/лм, S, F - площади светящейся поверхности и фотокатода, см², R - расстояние от источника до детектора, м, f - коэффициент увеличения светосбора для канала с отражающими стенками, $B(T)$ - величина, зависящая от температуры воздуха после прохождения ударной волны. Значения параметра B для ряда температур приведены в табл. 3.9.

Величина f определяется коэффициентом отражения света материалом канала $k < 1$. Для каналов, у которых длина значительно превышает диаметр, для расчета f можно пользоваться формулой $f = 1 + 8k/(1 - k)^2$.

Для того, чтобы измерения проводились в линейной области фотодетектора, длину и покрытие канала можно варьировать, исходя из ожидаемой в эксперименте амплитуды волны.

В выполненных измерениях временные интервалы отсчитываются между сигналами одинаковой природы, что практически снимает вопрос о поправках, обусловленных конечностью времени набора "черноты" излучающим слоем воздуха. Эти поправки практически оди-

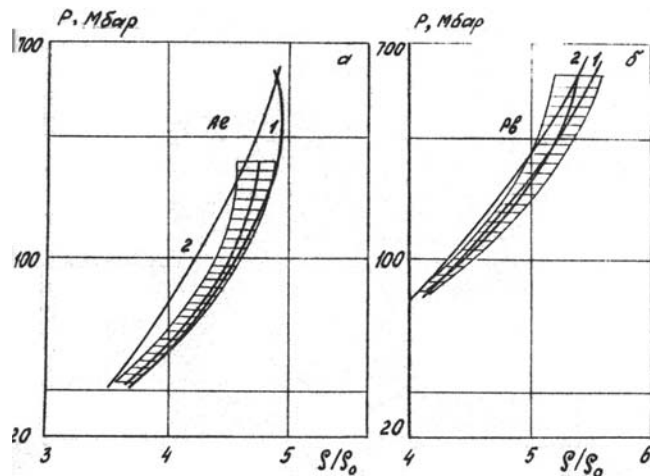


Рис. 3.27: Результаты статистической обработки экспериментальных данных для алюминия а) и свинца б): Номинальное положение ударных адиабат - в середине заштрихованных коридоров погрешностей. 1 - расчетные ударные адиабаты по интерполяции [114], [110], 2 - ТФ-ПК.

Эти поправки практически оди-

наковы для каждой контрольной поверхности и к тому же очень малы. Действительно, если для набора "черноты" волне в воздухе требуется пройти расстояние $\sim 3l_0$, где l_0 - усредненный по спектру пробег в воздухе нормальной плотности, тогда при выходе в воздух волны со скоростью D искомая поправка по времени равна $\Delta t = 3l_0/\delta(D - u) = 3l_0/D$.

Минимальная скорость волны в воздухе в наших измерениях $D \approx 80\text{км/с}$, температура за фронтом $T \approx 1.5 \cdot 10^5\text{К}$, $l_0 \approx 10^{-4}\text{см}$ [69] и $\Delta t \approx 0.04\text{нс}$.

Измерения проведены для следующих пар материалов: железо-железо-свинец, свинец-железо, железо-вода, железо-кварцит. Первое вещество в каждой паре стояло первым по ходу движения волны.

Выбор исследуемых веществ осуществлялся на основании следующих соображений. Алюминий представлял интерес благодаря сравнительной простоте достижения давлений, характерных для нижней полуволны осцилляции на ударной адиабате, и большой величине ее амплитуды. Различные теоретические модели указывают на уменьшение амплитуды осцилляции с увеличением атомного номера. С учетом опыта предыдущих исследований в качестве представителя веществ с большим z был выбран свинец. Оболочечные эффекты зависят от z немонотонно. Поэтому для химических соединений, в состав которых входят атомы с разным z , при некоторых ρ, T эффекты могут компенсироваться, а при других ρ, T - усиливаться. Трудоемкость расчетов для сложных веществ гораздо выше, чем для простых. С учетом сказанного в гл. 2, посвященной теоретическим моделям, вопрос о калибровке единственной модели, способной оценивать роль оболочечных эффектов в сложных веществах, стоит еще более остро. Этим и объясняется интерес к исследованию ударной сжимаемости воды и кварцита.

В опытах непосредственно определялись средние по контрольным базам величины волновых скоростей. Переход к их значениям на контактных границах осуществлялся расчетно. Величины поправок на затухание составляют 2-8% и зависят от материала (самые большие поправки в свинце). В соответствующей математической газодинамической программе используется неоднородный разностный метод [91] с выделением фронта сильных разрывов и с учетом теплопроводного и адиабатического режимов течения. Правильность поправок контролировалась в экспериментах. В табл. 3.9 приведены значения волновых скоростей на контактной границе пар. Там же указана суммарная погрешность (%), отвечающая доверительной вероятности 0,95. Основной вклад в погрешность волновых скоростей связан с неопределенностью выбора точки отсчета регистрируемого момента времени и обусловлен конечной толщиной луча осциллографа.

Анализ расчетных зависимостей, полученных по разным моделям для исследованных пар материалов, показал, что в обследованном диапазоне давлений мак-

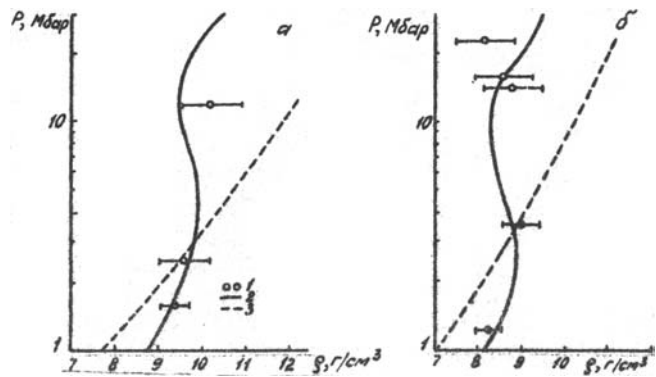


Рис. 3.28: Сжатие пористой (m) меди сильными ударными волнами: а - $m = 3$, δ - $m = 4$, 1 - эксперимент, 2 - модель ограниченного атома, 3 - расчет по ТФП.

Железо -	88.20 ± 0.7	71.25 ± 0.6	66.74 ± 0.6	63.65 ± 0.6	54.90 ± 0.6
Алюминий	42.63 ± 0.7	41.79 ± 0.6	36.77 ± 0.5		
	107.1 ± 0.9	85.98 ± 0.8	80.11 ± 0.8	75.03 ± 0.7	65.22 ± 0.6
	50.58 ± 0.7	49.59 ± 0.7	43.57 ± 0.6		
Железо -	89.6 ± 1	88.20 ± 0.7	71.25 ± 0.6	66.74 ± 0.6	62.65 ± 0.6
Свинец	54.90 ± 0.6	43.6 ± 1	42.63 ± 0.7	41.79 ± 0.6	36.77 ± 0.5
	78.4 ± 1	76.70 ± 0.7	61.33 ± 0.7	56.98 ± 0.6	53.43 ± 0.6
	46.60 ± 0.5	36.3 ± 1	35.44 ± 0.6	35.44 ± 0.6	30.42 ± 0.5
Свинец -	63.11 ± 0.6	49.09 ± 0.6			
Железо	72.58 ± 0.7	57.07 ± 0.6			
Железо -	45.54 ± 0.7				
Вода	64.10 ± 0.7				
Железо -	45.90 ± 0.7				
Кварцит	55.98 ± 0.7				

Таблица 3.5: Волновые скорости (км/с) на контактной границе пар

симальное различие в скоростях лежит в пределах 1.4-3.4 км/с для пары железо-алюминий и 1.2 - 2.3 км/с для пары железо-свинец, что превышает погрешность измерений. Статистическая обработка экспериментальных данных позволила заметно Уменьшить погрешность определения амплитуды осцилляции по сравнению с погрешностью одной точки. Из рис. 3.27, на котором приведены результаты обработки, отчетливо видно проявление оболочечной структуры на ударных адиабатах алюминия и свинца. Значения амплитуд хорошо согласуются с величинами, полученными по модели ССП. Изучаемая полуволна, возможно, более сжата по оси давления по сравнению с расчетом.

Наиболее рельефно плазменные эффекты выражены в экспериментах [73] по сжатию мощными ударными волнами пористой меди с $m = \rho_0/\rho_{00} = 3, 4$. В этих экспериментах за фронтом ударной волны генерировалась плазма с удельной энергией ≈ 0.75 МДж/г, концентрацией электронов $n_l \approx 2 \cdot 10^{23}$ см⁻³ и давлением до $p \approx 20$ Мбар (рис. 3.28). При максимальных температурах $T \sim 3 - 5 \cdot 10^5$ К снижается вырождение электронов $n_l \lambda_l \approx 0,7$ в пятикратно ионизованной плазме, а кулоновское и кратковременное взаимодействие остается сильным $\Gamma \approx 2$. В этих условиях, как видно из рис. 3.28, квазихимическая модель плазмы с учетом кулоновского взаимодействия в рамках кольцевого дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле статистической механики (Часть 2) осуществляет приемлемое описание динамического эксперимента [34]. Тогда как отличия от модели ТФП достигают $\approx 20 - 30\%$ по плотности и нескольких раз - по давлению.

На рис. 3.28 представлено сопоставление теоретических моделей с экспериментом [47] в ультрамегабарной области давлений [35].

При рекордно высоких из достигнутых в [47] давлениях $p \approx 4$ Гбар, температурах $T \approx 7 \cdot 10^6$ К, плотностях энергии $\approx 6 \cdot 10^4$ кДж/г плазма оказывается полностью ионизованной с $n_e \approx 3 \cdot 10^{24}$ см⁻³ и слабо вырожденной $n_e \lambda_e^3 \approx 0.06$. С уменьшением давления на ударной адиабате параметр неидеальности Γ возрастает от 0.05 до 8 (при p 10 Мбар), а короткодействующее отталкивание остается при этом заметным, что оправдывает применение кольцевого дебаевского приближения и модели твердых сфер (см. часть 2).

Таким образом, имеются достаточно определенные и увлекательные перспективы

продвижения исследований свойств вещества в область все более высоких давлений и температур, сведения о которых нужны для решения многих задач современной физики и технологий будущего.

Литература

- [1] Аврорин Е.Н., Водолага Б.К., Волков Л.П. и др. // ЖЭТФ. 1987. Т.93. Вып.2(8). С.613.
- [2] Аврорин Е.Н., Водолага Б.К., Симоненко В.А. и др. Мощные ударные волны и экстремальные состояния вещества. М.: РИСО ИВТАН. 1990.
- [3] Аврорин Е.Н., Водолага Б.К., Симоненко В.А., Фортов В.Е. //УФН. 1993. Т.163, №5. С.1.
- [4] Аврорин Е.Н., Водолага Б.К. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т.43. С.241.
- [5] Аврорин Е.Н., Водолага Б.К. и др. // ЖЭТФ. 1987. Т.93. С.613.
- [6] Агеев В.Г., Бушман А.В., Фортов В.Е. и др. Термодинамика плотной плазмы свинца в окрестности кривой высокотемпературного кипения // Письма в ЖЭТФ 1988. Т.48. №11. С.608-611.
- [7] Агрант М.В., Анисимов С.И., Мокшанцев Б.И. // ФТТ. 1987. Т.29. С.3433.
- [8] Ададудов Г.А., Дремин А.Н., Канель Г.И. // ПМТФ. 1969. №2. С.126.
- [9] Аккерман А.Ф., Демидов Б.А., Фортов В.Е. и др. Применение сильнооточных релятивистских электронных пучков в динамической физике высоких температур и давлений. Черноголовка: РИСО ОИХФ. 1986.
- [10] Аккерман А.Ф., Бушман А.В., Фортов В.Е. и др. // ЖЭТФ. 1986. Т.91. Вып.5(11). С.1762.
- [11] Алексеев Ю.А., Ратников В.П., Рыбаков А.П. // ПМТФ. 1971. №2. С.101.
- [12] Алексеев В.А., Веденов А.А., Красицкая Л.С. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т.12, №11. С.501-504.
- [13] Альтшулер Л.В. и др. // ЖЭТФ. 1978. Т.78. С.741.
- [14] Альтшулер Л.В. // УФН. 1965. Т.85. Вып.2. С.197.
- [15] Альтшулер Л.В., Баканова А.А. // УФН. 1968. Т.96. С.193.
- [16] Альтшулер Л.В., Моисеев Б.П., Попов Л.В. и др. // ЖЭТФ. 1968. Т.54. № 3. С.785.
- [17] Альтшулер Л.В., Баканова А.А., Бушман А.В. и др. // ЖЭТФ. 1977. Т.73. №5(11). С.1866.

- [18] Альтшулер Л.В., Бушман А.В., Жерноклетов М.В. и др. // ЖЭТФ. 1980. Т.78. №2. С.741.
- [19] Ананьин А.В., Дремин А.Н., Канель Г.И. // ФГВ. 1981. №3. С.93.
- [20] Андрияш А.В., Симоненко В.А. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. теор. и прикл. физ. 1984. Вып.2(2). С.52.
- [21] Анисимов С.И., Прохоров А.М., Фортов В.Е. // УФН. 1983. Т.134. Вып.4. С.1000.
- [22] Анисимов С.И., Прохоров А.М., Фортов В.Е. // УФН. 1984. Т.142. Вып.3. С.395.
- [23] Бабкин М.В., В кн.: Итоги науки и техники. Сер.: Физика плазмы. М.: ВИНТИ. 1981. Т.1. Ч.2. С.5.
- [24] Баданов О.В., Беспалов В.Е., Терновой В.Я. и др. // ТВТ. 1985. Т.23. №5. С.976.
- [25] Баженова Т.В., Гвоздева Л.Г. Нестационарные взаимодействия ударных волн. М.: Наука. 1977.
- [26] Базанов О.В., Беспалов В.Е. и др. // ТВТ. 1985. Т.3. С.976.
- [27] Байбуз В.Ф., Зицерман В.Ю. и др., Химическое равновесие в неидеальных системах (Под. ред. Юнгмана В.С.) М.: ИВТАН. 1986.
- [28] Барышев К.И., Болховитинов Л.Г., Голлер Е.Э. и др. // Горный журнал. 1970. №3. С.170.
- [29] Баум Ф.А., Орленко Л.П., Станюкович К.П., Чельшев В.П., Шехтер Б.И. Физика взрыва. М.: Наука, 1975.
- [30] Беловолов М.И., Вовченко В.И. и др. // Журнал техн.физики. 1988. Т.1. С.27.
- [31] Беспалов В.Е., Вовченко А.И. и др. // Журнал техн.физики. 1986. Т.12. С.3.
- [32] Беспалов В.Е., Грязнов В.К., Фортов В.Е. // ЖЭТФ. 1979. Т.76, Вып.1. С.140.
- [33] Беспалов В.Е., Кулиш М.И., Фортов В.Е. // ТВТ. 1986. Т.24. №5. С.995.
- [34] Беспалов В.Е., Грязнов В.К., Дремин А.П. и др. // ЖЭТФ. 1976. Т.69. Вып.6(12). С.2059.
- [35] Беспалов В.Е., Дьячков Л.Г., Кобзев Г.А. и др. // ТВТ. 1979. Т.17. №2. С.266.
- [36] Биберман Л.М., Ликальтер А.А., Якубов И.Т. //ТВТ. 1982. Т.20. №3. С. 565.
- [37] Бондаренко Ю.А., Бурдонский И.Н., Гаврилов В.В. и др. // ЖЭТФ. 1981. Т.81. №1(7). С.170.
- [38] Бушман А.В., Короткова Г.И. и др. // ТВТ. 1985. Т.23. С.1193.
- [39] Бушман А.В., Глушак Б.Л. Фортов В.Е. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т.44. Вып.8. С.375.
- [40] Бушман А.В., Воробьев О.Ю., Фортов В.Е. и др. Численное моделирование воздействия мощных ионных пучков на металлические мишени. Черноголовка: РИ-СО ОИХФ. 1987.

- [41] Бушман А.В., Ломакин Б.Н., Сеченов В.А., Фортов В.Е., Шекотов О.Е., Шарипджанов И.И. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69, вып. 5. С. 1624.
- [42] Бушман А.В., Красюк И.К., Фортов В.Е. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т.39 Вып.8. С.341.
- [43] Бушман А.В., Канель Г.И. и др. Динамика конденсированных сред при интенсивных импульсных воздействиях. Механические свойства. Препринт: Черноголовка: ОИХФ. 1983.
- [44] Бушман А.В., Канель Г.И., Ни А.Л. и др. Теплофизика динамики интенсивных импульсных воздействий. Черноголовка.: РИСО ОИХФ. 1988.
- [45] Бушман А.В., Фортов В.Е. // УФН. 1983. Т.140. Вып.2. С.177.
- [46] Владимиров А.С., Волошин Н.П., Симоненко В.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т.39. Вып.2. С.69.
- [47] Волков Л.П., Владимиров Н.П., Аврорин Е.Н. и др. // Письма в ЖЭТФ. Т.31. Вып.11. С.623.
- [48] Волков Л.П., Волошин Н.П., Мангасаров Р.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1980. Т.31. Вып.9. С.546.
- [49] Гандельман Г.М. // ЖЭТФ. 1966. Т.51. С.147.
- [50] Грязнов В. К., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. // ЖЭТФ, 78, 573 (1980).
- [51] Грязнов В.К., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н. и др. // ЖЭТФ. 1980. Т.78. Вып.2. С.573.
- [52] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б.Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е. Теплофизические свойства рабочих сред газозофазного ядерного реактора (под ред. Иевлева В.М. - М.: Атомиздат, 1980)
- [53] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. // Письма в ЖЭТФ. 1982. Т.8. С.1378.
- [54] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. // ПМТФ. 1973. № 3. С.70.
- [55] Грязнов В.К., Фортов В.Е. // ТВТ. 1987. Т.25. С.1208.
- [56] Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Красников Ю. Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б. Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е. Теплофизические свойства рабочих сред газозофазного ядерного реактора (Под ред. Иевлева В.М.) (М.: Атомиздат,1980).
- [57] Демидов Б.А., Мартынов А.И., Рудаков Л.И. и др. // ЖЭТФ. 1981. Т.80. Вып.2. С.738.
- [58] Дремин А.Н., Канель Г.И., Черникова О.Б. // ПМТФ. 1981. №4, С.132.
- [59] Дремин А.Н., Канель Г.И., Глузман В.Д. // ФГВ. 1972. №1, С.104.

- [60] Дремин А.Н., Канель Г.И. // ФГВ. 1972. №1. С.147.
- [61] Дремин А.Н., Савров С.Д., Трофимов В.С., Шведов К.К. Детонационные волны в конденсированных средах. М.: Наука. 1970.
- [62] Дюдерштадт Дж., Модес Г. Инерционный управляемый синтез. М.: Энергоатомиздат. 1985.
- [63] Егоров Л.А., Ниточкина Э.В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1972. Т.16. С.8.
- [64] Жарков А.П., Глушак Б.Л., Фортов В.Е. и др. // ЖЭТФ. 1989. Т.96. Вып.4. С.1301.
- [65] Жерноклетов М.В., Зуборев В.М., Сутулов Ю.Н. и др. // ПМТФ. 1984. №1. С.119.
- [66] Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Химия плазмы. Под ред. Б.М.Смирнова. М.: Энергоатомиздат. 1984. Вып.11. С.130-169.
- [67] Забабахин Е.И. Механика в СССР за 50 лет. М.: Наука. 1970. Т.2. С.313.
- [68] Запорожец Ю.Б., Минцев В.Б., Фортов В.Е. // Письма в ЖЭТФ. 1987. Т.13. Вып.4. С.204.
- [69] Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука. 1966.
- [70] Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ. 1957. Т.32. С.1577.
- [71] Зельдович Я.Б., Новиков И.Д. Релятивистская астрофизика. М.: Наука, 1971.
- [72] Златин Н.А., Красильщиков А.П., Мишин Г.И., Попов Н.Н. Баллистические установки и их применение в экспериментальных исследованиях. М.: Наука. 1974.
- [73] Зубарев В.Н. и др. Детонация. Черноголовка: ОИХФ. 1978.
- [74] Иванов А.Г., Новиков С.А. // Приборы и техника эксперим. 1963. Т.7. №1. С.135.
- [75] Иванов Ю.В., Дремин А.Н., Минцев В.Б. и др. // ЖЭТФ. 1976. Т.71. №1. С.215.
- [76] Иванов В.В., Швец И.С., Иванов А.В. Подводные искровые разряды. Киев: Наукова думка, 1982.
- [77] Иевлев В.М. // Изв. АН СССР. Сер. Энергетика и транспорт. 1977. №6. С.24-31.
- [78] Иосилевский И.Л., Грязнов В.К. // ТВТ. 1981. Т.19(6). С.1121.
- [79] Кальдиурола П., Кнопфель Г. Физика высоких плотностей энергии. М.: Мир. 1974. 484С.
- [80] Канель Г.И. Применение манганиновых датчиков для измерения, давления ударного сжатия конденсированных сред. ВИНТИ, №477-74 Деп. 1974.
- [81] Канель Г.И., Вахитова Г.Г., Дремин А.Н. // ФГВ. 1978. №2. С.130.
- [82] Канель Г.И., Молодец А.М., Воробьев А.А. // ФГВ. 1974. №6 С.884.

- [83] Канель Г.И., Разоренов С.В., Уткин А.В., Фортов В.Е. Ударно-волновые явления в конденсированных средах. М: Янус-К, 1996.
- [84] Кикоин И.К., Сенченков А.П., Гельман Э.Б. и др. // ЖЭТФ. 1965. Т.49. №1. С.124.
- [85] Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. // УФН. 1975. Т.117. №1. С.3.
- [86] Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. // УФН. 1976. Т.119 Вып.3. С.357.
- [87] Кормер С.Б. // УФН. 1968. Т.94. Вып.4. С.641.
- [88] Кормер С.Б., Фунтиков Л.И., Урлин В.Д. и др. // ЖЭТФ. 1962. Т.42. Вып.3. С.686.
- [89] Красников Ю.Г., Ломакин Б.Н. Минск: Наука и техника. 1970.
- [90] Кунавин А.Г, Кириллин А.В. Коршунов Ю.С. // ТВТ. 1974. Т.12. №6. С.1302.
- [91] Куропатенко В.Ф. // Численные методы механики сплошных сред. 1984. Т.15, С.81.
- [92] Лазеры и термоядерная проблема. Под ред. Б.Б.Кадамцева. М.: Атомиздат, 1973.
- [93] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976.
- [94] Леонтьев А.А., Фортов В.Е. // ПМТФ. 1974. №4. С.162.
- [95] Леонтьев А.А., Фортов В.Е., Дремин А.Н. // Горение и взрыв. М.: Наука. 1977. С.515.
- [96] Ломакин Б.Н., Лопатин А.Д. // ТВТ. 1983. Т.21. №1. С.163.
- [97] Ломакин Б.Н., Фортов В.Е. // ЖЭТФ. 1972. Т.63, вып.1. С.92.
- [98] Никулин М.А., Попов Е.Г. Излучательные свойства ударных волн в газах. М.: Наука. 1977.
- [99] Манзон Б.М. // УФН. 1981. Т.134. Вып.4. С.611.
- [100] Минеев В.Н., Иванов А.Г. // УФН. 1976. Т.119. Вып.1. С.75.
- [101] Минцев Б.В., Фортов В.Е. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т.30. Вып.7. С.401.
- [102] Минцев В.Б., Грязнов В.К., Фортов В.Е. // ЖЭТФ. 1980. Т.79. Вып.1. С.116.
- [103] Модель И.Т. // ЖЭТФ. 1957. Т.32. Вып.4. С.714.
- [104] Модель И.Т., Нарожный А.Т. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т.41. Вып.6. С.270.
- [105] Павловский М.Н. // ЖЭТФ. 1977. Т.73. Вып.1. С.237.
- [106] Постнов В.И. В сб.: Нестационарные проблемы гидродинамики, Новосибирск, 1980. Вып.48. С.116.

- [107] Прохоров А.М., Анисимов С.И., Пашинин П.П. // УФН. 1976. Т.119. №3. С.401.
- [108] Разоренов С.В., Канель Г.И., Овчинников А. А. //В сб: Детонация. Черногловка. 1981. С.70.
- [109] Рябин Ю.П. Газы при больших плотностях и высоких температурах. М.: Физматгиз. 1959.
- [110] Сапожников А.Т., Першина А.В. // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач матем. физики. 1979. Вып.4(6). С.47.
- [111] Семенов А.М., Шпильрайн Э.Э., в сб. Уравнение состояния газов и жидкостей, М.: Наука, 1975.
- [112] Сеченов В.А., Сон Э.Е., Щекотов О.Е. // ТВТ. 1977. Т.15. №1. С.196.
- [113] Симоненко В.А., Волошин Н.П., Волков Л.П. и др. // ЖЭТФ. 1985. Т.88. Вып.4. С.1452.
- [114] Синько Г.В.//Численные методы механики сплошных сред. 1979. Т.10. С.124.
- [115] Степанов Г.В. Упруго-пластическое деформирование и разрушение материала при импульсном нагружении. Киев, Наукова думка. 1991. 288С.
- [116] Степанов Г.В. Поведение конструкционных материалов в упругопластических волнах нагрузки. Киев: Наукова думка, 1978.
- [117] Теплофизические свойства плазмы смеси гелия с водородом. В.И.Кучеренко, Г.А.Павлов, В.К.Грязнов и др. Препринт. Черногловка: Изд. ОИХФ АН СССР, 1978.
- [118] Трунин Р.Ф., Симаков Г.В. и др. // ЖЭТФ. 1972. Т.62. С.1043.
- [119] Трунин Р.Ф., Подурец М.А., Симаков Г.В. и др. // ЖЭТФ. 1972. Т.62. №3. С.785.
- [120] Трунин Р.Ф., Подурец М.А., Моисеев Б.П. и др. // ЖЭТФ. 1969. Т.56. №4. С.1172.
- [121] Урлин В.Д., Кормер С.Б., Попова Л.Т. // ФТТ. 1961. Т.3. С.2131.
- [122] Уртьев П.А., Эрикссон Р.М., Хейс Б., Паркер М.Л. // ФГВ. 1986, №5, С.113.
- [123] Ударные волны и экстремальные состояния вещества. Сб. под ред. Фортова В.Е., Альтшулера Л.В., Трунина Р.Ф., Фунтикова А.И. М: Наука. 2000.
- [124] Фортов В.Е. // ФГВ. 1972. №8. С.428.
- [125] Фортов В.Е. // УФН. 1982. Т.138. Вып.3. С.361.
- [126] Фортов В.Е., Дремин А.Н. // ФГВ. 1973. №9. С.743.
- [127] Фортов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А. // ТВТ. 1975. Т.13. №5. С.1072.

- [128] Фортов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1974. Т.20. Вып.1. С.30.
- [129] Фортов В.Е., Иванов Ю.В., Дремин А.П. и др. // ЖЭТФ. 1975. Т.69. Вып.4. С.1624.
- [130] Фортов В.Е., Красников Ю.Г. // ЖЭТФ. 1970. Т.59, вып.5. С.1645.
- [131] Фортов В.Е., Леонтьев А.А. // ТВТ. 1976. №4. С.711.
- [132] Фортов В.Е., Леонтьев А.А., Грязнов В.К. и др. // ЖЭТФ. 1976. Т.71. Вып.1. С.225.
- [133] Фортов В.Е., Якубов Т.И. Неидеальная плазма. М.: Энергоатомиздат. 1994.
- [134] Фортов В.Е., Якубов И.Т. //Физика неидеальной плазмы. Черногловка, ОИХФ. 1984.
- [135] Христофоров Б.Д., Голлер Е.Э., Сидоров А.Я. и др. // ФГВ. 1971. №4. С.613.
- [136] Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизированного равновесия в плазме и твердом теле. М.: Мир. 1979.
- [137] Якуб Е.С. // ТВТ. 1976. Т.14. С.893; ЖФХ. Т.60. 1986. С.2184; Molecular Physics V.77. 1992. P.845.
- [138] Asay J.R., Trucano T.O., Chabildas L.C. // J. Appl. Phys. 1974. V.45. N6. P.159.
- [139] Asay J.R., Barker L.M. // J. Appl. Phys. 1974. V.45. N6. P.3540.
- [140] Barker L.M., Hollenbach R.E. // J. Appl. Phys. 1972. V.43. P.4669.
- [141] Bauer F. // Proc. 1-st Symp. on Gauges and Piezoresistive Materials. A.D.E.R.A. Bordeaux. 1981.
- [142] De Beaumont Ph., Leygonie L.J. // 5-th Inter. Symp. on Detonation. Pasadena. 1970. P.430.
- [143] Bernstein D., Keough D.D. // J. Appl. Phys. 1964. V.35. N5. P.1471.
- [144] Bloomquist D.D., Sheffield S.A. // J. Appl. Phys. 1983. V.54. N4. P.1717.
- [145] Bridgman P.W. // Proc. Amer. Acad. Arts and Sci. 1911-1912, V.47. P.321.
- [146] Bridgman P.W. // Proc. Amer. Acad. Arts and Sci. 1940. V.74. P.I.
- [147] Bushman A.V., Fortov V.E. // Thermophysics. / Ed.: V.E.Fortov, A.Sheindlin. Harwood. Academic Publishing. N.Y. V.I.P. 162.
- [148] Chabildas L.C., Asay J.R. //J. Appl. Phys. 1979. V.50. N4. P.2749.
- [149] Cristian R.H., Jarder F.L. // Chem. Phis. 1955. V.33. P.2042.
- [150] Davison L., Graham R.A. // Phys. Repts. 1979. V.5. N5. P.256.
- [151] Deaumont P., Leygonie A. //Proc. of V Simpos. on Detonat. Pasadena. 1970. P.430.

- [152] Duvall G.E. // *Rev. Mod. Phys.* 1977. V.49. N3. P.525.
- [153] Ebeling W., Fortov V.E., Forster A. et al. // *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*. AVG. Leipzig. 1991.
- [154] Fortov V.E., et al. // *JETP Lett.* 1974. V.20. P.13.
- [155] Fowles G.R., Duvall G.E., Asay J. et al. // *Rev. Sci. Instrum.* 1970. V.41. N7. P.984.
- [156] Fritz J.N., Morgan J.A. // *Rev. Sci. Instrum.* 1973. V.44. P.215.
- [157] Froeschner K.E., Chau H. et al. // *Shock Waves in Condensed Matter-1981*. / Ed.: Nellis W.J., Seaman L.A., Graham R.A. AIP, New-York, 1982. P.174.
- [158] Froschner K.F., Lee R.S. // *Shock Wave in Condensed Matter-1983*. / Ed.: J.R.Asay, R.A.Graham, G.K.Straub. N.Y.: Elsever. 1984. P.87.
- [159] Fuller J.A., Price J.H. // *Nature*. 1962. V.193. N 4812, P.262.
- [160] Fuller J.A., Price J.H. // *Brit. J. Appl. Phys.* 1964. V.15., N6. P.751.
- [161] Goldstone P.D., Benjamin R.F., Schaltz R.B. // *Phys. Lett.* 1979. V.38. P.761.
- [162] Graham R.A., Asay J.R. // *High Temperatures-High Pressures*. 1978. V.10. P.355.
- [163] Graham R.A. // *J. Appl. Phys.* 1975. V.46, P.1901.
- [164] Graham R.A. // *Phys. Rev.B.* 1972. V.6. P.4779.
- [165] Hall T.A., Djaamet A. // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V.60. N20. P.2004.
- [166] Hansen J.P. // *Phys. Rev.* 8A. 1973. P.3096; Baus M. and Hansen J.P. // *Phys. Rep.* 1980. P.1.
- [167] Hensel F. // *Proc. VII Intern. Conf. on Amorphous Liquid Semicond. Contrib. Papers*. Edinburg. 1977. P.58-70.
- [168] Hess H. // *Contrib. Plasma Phys.* 1989. V.29, N4/5. P.473.
- [169] Holmes N.C., Trainor R.J. // *Phys. Rev. A.* 1982. V.25. P.160.
- [170] Hore R.M., Schwar H.J., Hoval H. // *Laser Interaction and Related Plasma Phenomena*. N.Y.: Plenum. 1981. V.5. P.253.
- [171] Hornung K., Michel K.W. // *J. Chem. Phys.* 1972. V.56. N5. P.2072.
- [172] Iakubov L.T., Vorobijev V.S. *Astronautic Acta*. 1974. Vol.18. P. 79-83.
- [173] Ikezi H., Schwarzenegger K., Simons A. et.al. // *Phys.Rev.A.* 1978. V.18. N6. P.2494.
- [174] Jachson R.K. et al. // *Proc. VI Internat. Sympos. on Detonation, ONR, ACR-221*. 1976. P.775.
- [175] Johnson Q., Mitchell A.C. *High Pressure Science Technology* /Ed. B.Vodar, Ph.Marteau. Oxford: Pergamon 1973.

- [176] Johnson Q., Mitchell A.C., Smith J.D. // *Rev. Sci. Instr.* 1980. V.51. P.741.
- [177] Jones A.H., Isbell W.M., Maiden C.M. // *J. Appl. Phys.* 1966. V.37. P.3493.
- [178] Keeler R.N., Alder B.J. // *Physica*. 1980. V.21. P.1658.
- [179] Kerley G.J., Wise]. // *Shock waves in condensed matter.* / Ed.: S.C.Schmidt, N.C.Holmes. N.Y.: Elsever. 1987. P.155.
- [180] Kormer S.B. // *Sov. Phys. JETP*. 1968. V.11. P.229.
- [181] Lee L.M. // *J. Appl. Phys.* 1973. V.44. N9. P.4017.
- [182] Lepouter M. *Metall Ammonia Solutions*. N.Y.: Acad. Press, 1965.
- [183] Mihchell A.C., Nellis W.J. // *Rev. Sci. Instrum.* 1981. V.52. P.347.
- [184] McMillan C.F., Goosman D.R., Parker N.L. et al. // *Rev. Sci. Instrum.* 1988. V.59. N1. P.1.
- [185] More R.M. *Atomic and Molecular Physics of Controlled Thermonuclear Fusion* /Ed. Ch.J.Joachein, D.E.Post. N.Y.: Plenum, 1983. P.339-440.
- [186] Murri W.J., Curran D.R., Petersen C.F., Crewdson R.C. // *Adv. High Press. Res. USA*. 1974. V.4. P.1.
- [187] Ng A., Parfeniuk D., Da Silva A. // *Phys Rev. Lett.* 1985. V.52. N24. P.2604.
- [188] Ng A., Parfeniuk D., Da Silva A. // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V.54. N13. P.1595.
- [189] Nellis W.J., Ree F.H., Van Thiel M., Mitchell A.C. // *Phys. Rev. Lett.* 1988. V.48, N12. P.816.
- [190] Nellis W.J. et al // *Phys. Rev. Lett.* 1979. V.48 P.816, // *J. Chem. Phys.* 1980.V.73. P.6137.
- [191] Osher J., Barnes G., Chau H. et al. // *IEEE Transactions on Plasma Science*, 1989. V.17. N3. P.392.
- [192] Paisley D.L., Warnes R.H., Kopp R.A. // *Shock Compression of Condensed Matter-1991.* / Ed.: Schmidt S.C., Dick R.D. et al. *Els.Sc.Publ.* 1992.
- [193] Parry D.J., Griffiths L.J.A. // *J. Phys. Sci. Instrum.* 1979. V.12. N1. P.56.
- [194] Peal W.L. // *J. Appl. Phys.* 1957. V.28. N7. P.782.
- [195] Perry F.C., Winder H.M. // *J. Appl. Phys.* 1976. V.47. P.127.
- [196] PfeiferP., Freyland W.F., Hensel F. // *Phys. Lett.A.* 1973. V.43. N2. P.111.
- [197] Ragan C.E., Silberet M.G., Diven B.C. // *J. Appl. Phys.* 1977. V.48. P.2860.
- [198] Ragan III C.E. // *Phys. Rev. A.* 1980. T.21. P.458.
- [199] Ragan III C.E. // *Phys. Rev. A.* 1982. T.25. P.3360.
- [200] Ragan III C.E. // *Phys. Rev. A.* 1984. T.29. P.1391.

- [201] Rogers F.J., Ross M., Haygein G.L., Wong L.K. TBT Report UCID - 1957, 1980.
- [202] Rennet J.S. // Appl. Phys. Lett. 1981. V.38. N16. P.226.
- [203] Research of Uranium Plasmas and their Technological Applications. Proc. of Sympos., Gainesvills/ Ed. K. Thom, R.T.Schneider. Wash.: NASA, 1971, 2nd Symp. of Uranium plasmas, Atlanta. Wash.: NASA, 1971.
- [204] Roman J.P., Cottete F. // Physics. 1986. V.139. P.545.
- [205] Roze M., Nellis W.J., Mitchel A.C. // Chem. Phys. Lett. 1979. V.68. P.532.
- [206] Rosen M.D., Phillipson D.W. // Shock Wave in Condensed Matter-1983. / Ed.: J.R.Asay, R.A.Graham, G.K.Straub. N.Y.: Elsever. 1984. P.323.
- [207] Scidmore C., Morris E. // Proc. Sympos. on Thermodynamics of Nuclear Materials. Vienna: J.A.E.A. 1962. P.173.
- [208] Sigel R. // Phys. Rev. 1974. V.33. P.1020.
- [209] Shaner J.W. Gathers G.R. High Pressure Science and Technology. / Ed.: Timerhous K.D., Barber M.S. N.Y.: Plenum. 1979. P.847.
- [210] Shatzman E. // Strongly Coupled Plasmas. / Ed.: G.Kalman, P.Corini. N.Y.-London: Plenum Press. 1978. P.409.
- [211] Sweeney M.A., Perry F.C., Asay J.R. // Bull. Amer. Phys. Soc., 1981. V.26. A139. P.650.
- [212] Trainor R.J., Graboske H.C., Long K.S., Shaner J.W. Reprint VCRL-52562, 80257, 82141.
- [213] Trainor R.J., Shaner J.W., Auerbach J.M., Holmes N.C. // Phys. Rev. Lett. 1979. V.42. N17. P.1154.
- [214] Trainor R.J., Holmes N.C., Anderson R.A. // Shock Wave in Condensed Matter-1981. / Ed.: WJ.Nellis, L.Seaman, R.A.Grolham. N.Y.: North Holland. 1982. P.145.
- [215] Urtiew P.A., Erickson L.M. // In: "Dynamics of Detonations and Explosion: Detonations. Ed.: Kuhl A.L., Leyer J.C., Borisov A.A., Sirignono W.A. / 1991. V.133. AIAA. Washington, DC. P.371.
- [216] Vessel L., Solem J. // Phys. Rev. Lett. 1978. V.40. P.1391.

Часть II

Термодинамические свойства плазмы

Глава 4

Общее термодинамическое описание плазмы

4.1 Структура термодинамического описания

Термодинамическое описание (ТО) свойств равновесной НТП может быть условно разделено на три уровня:

1. Уровень суммарных термодинамических функций, не содержащий структурной информации о взаимных корреляциях частиц, составляющих НТП.
2. Более детальный, уровень структурных характеристик - корреляционных функций, включающий в дополнение еще и полный набор s -частичных корреляторов координат и/или импульсов частиц, составляющих НТП. При этом s -частичные корреляторы должны, строго говоря, относиться к наблюдаемым частицам (т.е. ядрам и электронам), составляющим в конечном счете любое вещество. Такой подход традиционно носит условное название "физической модели плазмы" (ФМП).
3. Комбинированный, доминирующий в практике реальных расчетов термодинамических свойств НТП третий, квазихимический подход ("химическая модель плазмы" (ХМП) см. например, [32] [192]). В ХМП система описывается как состоящая из тех же элементарных частиц (т.е. ядер и электронов), но либо в свободном состоянии, либо в связанном. В этом последнем случае частицы входят в состав комплексных частиц (атомов, молекул, атомных или молекулярных ионов и т.д. вплоть до макрообъектов - микрокапель, пылинок и др., формально описываемых как макромолекулы). Существенно, что в химической модели уже в нулевом, идеально-газовом приближении распределение элементарных частиц по составленным из них сортам комплексных частиц - то есть равновесный состав - уже означает приближенное описание ненулевых корреляций в системе. В качестве примера можно привести описание плотного и горячего водородного флюида, как сильно коррелированной электрон-протонной системы ("физическая модель"). В этом подходе непосредственно "наблюдаемыми" являются полные корреляции протон-протон, протон-электрон и электрон-электрон ($p-p$, $p-e$ и $e-e$), которые на языке ХМП соответствуют суммарным $p-p$, $p-e$

и $e - e$ корреляциям протонов и электронов, как свободных, так и входящих в состав атомов H , H_2 , H_2^+ , H^- и т.д.

4.1.1 Суммарные термодинамические функции

Совокупность термодинамических функций любого вещества может быть организована в упорядоченную структуру "пирамидального" типа, во главе которой поставлен какой-либо из "производящих" термодинамических потенциалов (ТП) в своих естественных переменных. Например, это может быть свободная энергия Гельмгольца $F(N, T, V)$ как функция температуры T , объема V , и числа частиц N . Задание этого ТП в принципе полностью задает всю термодинамическую информацию о системе на уровне суммарных термодинамических функций. Эта информация производится при последовательном дифференцировании ТП по своим переменным. Первый после ТП уровень составляют первые производные ТП и алгебраические комбинации с их участием, такие как давление p , энтропия S , химический потенциал μ , внутренняя энергия U , и т.д. Соответственно, следующий уровень ТО составлен с участием вторых производных ТП и т.д. Такое упорядочение совокупности термодинамических функций может быть реализовано различными способами в зависимости от выбора производящего ТП и его переменных. Особенность теоретического описания термодинамики НТП, в особенности неидеальной, состоит в том, что в нём особую роль играют два из упомянутого множества эквивалентных способов организации ТО. В первом в качестве производящего ТП фигурирует свободная энергия Гельмгольца $F(N, V, T)$. Во втором - "большой" термодинамический потенциал $\Omega(\mu, V, T)$. Оба эти варианта в ряде случаев называют описанием соответственно "в плотностях" ($n \equiv N/V$) или "в активностях" $\{z \equiv \exp(\beta\mu), \beta \equiv 1/kT\}$. Дальнейшее изложение будет преимущественно опираться на вариант, когда роль производящего потенциала играет потенциал $F(N, V, T)$. Известно, что потенциал $F(N, V, T)$ содержит всю термодинамическую информацию, включая не только объемные, но и поверхностные свойства. В случае, когда наш интерес ограничен только объемными термодинамическими свойствами, реальная размерность всей термодинамической "пирамиды" оказывается на единицу меньше. Она может быть составлена только из удельных термодинамических величин, и вышеупомянутые термодинамические функции первого уровня $p(N/V, T)$, $u(N/V, T)$, $s(N/V, T)$ и $\mu(N/V, T)$ в термодинамическом пределе ($N \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, N/V = n = const$) оказываются связанными уравнением Гиббса-Дюгема:

$$d\mu + sdT - vdp = 0, \quad \mu = pv + u - Ts, \quad \text{где } u \equiv U/N, \quad v \equiv V/N, \quad s \equiv S/N. \quad (4.1)$$

4.1.2 Расширенное описание

Описанная пирамидальная структура естественно обобщается, когда в состав естественных переменных термодинамического потенциала, теперь уже выступающего как производящий функционал (Боголюбов Н.Н., 1946), помимо термодинамических параметров дополнительно включаются одно- двух- и т.д.-частичные потенциалы межчастичного взаимодействия $V_1(\mathbf{r}_i), V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j), V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k), \dots$:

$$F \equiv F(N, V, T, \{V_1, V_2, V_3, \dots\}). \quad (4.2)$$

Формально последовательность потенциалов $\{V_s(\mathbf{r}_1 \dots, \mathbf{r}_j)\}$ бесконечна, но в реально интересных ситуациях, как правило, существенно участие одно- и двухчастичного потенциалов $V_1(\mathbf{r}_i)$, $V_2(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$. В термодинамической классификации эти потенциалы являются интенсивными переменными. Существенно, что термодинамически сопряженными с ними экстенсивными переменными являются s -частичные корреляционные функции (см. ниже):

$$\frac{\delta F}{\delta V_1(\mathbf{x})} \equiv \left[\frac{\delta F}{\delta V_1(\mathbf{x})} \right]_{N,T,V} = \left[\frac{\delta \Omega}{\delta V_1(\mathbf{x})} \right]_{\mu,T,V} = \langle N(\mathbf{x}) \rangle \equiv n_1(\mathbf{x}) \equiv nF_1(\mathbf{x}), \quad (4.3)$$

$$\frac{\delta F}{\delta V_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})} = \left(\frac{N^2}{2V} \right) F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \left(\frac{V}{2} \right) n_1(\mathbf{x})n_1(\mathbf{y}) [h_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - 1]. \quad (4.4)$$

В частности, в однородном случае

$$V_1(\mathbf{r}_i) \equiv 0, \quad n(\mathbf{r}) \equiv n = const, \quad F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = F_2(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = F_2(r),$$

$$\frac{\delta(F/V)}{\delta V_2(r)} = \left(\frac{n^2}{2} \right) F_2(r) = \left(\frac{n^2}{2} \right) [h_{12}(r) - 1]. \quad (4.5)$$

Одним из важных следствий этой сопряженности $V_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ и $F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ является то, что преобразование Лежандра, меняющее ролями зависимые и независимые термодинамически сопряженные переменные, в классической системе приводит к переходу от неидеальной составляющей свободной энергии $F(N, T, V | V_1(\mathbf{r}), V_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}))$ к неидеальной составляющей энтропии, как к потенциалу, для которого естественными переменными являются $F_1(\mathbf{x})$ и $F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ [185]:

$$F(V_1(\mathbf{r}), V_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})) \Leftrightarrow S(F_1(x), F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})).$$

4.1.3 Уравнения состояния

Для части объектов уровня первых производных ТП принято использовать термин уравнение состояния (УРС). Помимо традиционно понимаемого в этом качестве термического УРС - связывающего между собой давление p , температуру T и плотность ρ (или удельный объем, $v \equiv 1/\rho$) - $p(\rho, T)$, важным для термодинамики НТП является т.н. калорическое УРС - описывающее внутреннюю энергию U , например, $U(\rho, T)$. Исключительную роль во взаимоотношении термодинамики и гидродинамики играет разновидность калорического УРС, в котором внутренняя энергия U (или энтальпия $H \equiv U + pV$) выражается в виде функции от пары сопряженных термодинамических переменных - давления и объема (или плотности) - $U(p, V)$. Ниже для этого вида калорического УРС будет использоваться термин усеченное калорическое уравнение состояния. Известно, что усеченное калорическое УРС является принципиально неполным в смысле термодинамического описания системы, так как содержит только механическую часть необходимой термодинамической информации. Однако, во многих ситуациях именно эта информация - $U(p, V)$ - является наиболее важной, так как исчерпывает все что требуется от термодинамики для расчета широкого и практически важного класса адиабатических гидродинамических течений.

4.1.4 Дифференциальные термодинамические характеристики

Из этих характеристик практически важны прежде всего три вторые производные ТП - $(\partial p/\partial V)_{T,N}$, $(\partial S/\partial T)_{N,V}$ и $(\partial \mu/\partial N)_{V,T}$, две из которых, $(\partial p/\partial V)_{T,N}$ и $(\partial \mu/\partial N)_{V,T}$, в термодинамическом пределе являются зависимыми :

$$\left(\frac{\partial p}{\partial n}\right)_T = n \left(\frac{\partial \mu}{\partial n}\right)_T. \quad (4.6)$$

Широко используются и другие характеристики:

$$C_x \equiv T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{N,x} \quad (x = V, p), \alpha_p \equiv \rho^{-1} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p, \gamma_T \equiv \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho}\right)_T, \quad (4.7)$$

$$\gamma_S \equiv \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln \rho}\right)_S = \left(\frac{C_p}{C_V}\right) \gamma_T, \kappa_T \equiv \rho^{-1} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_T \equiv (p\gamma_T)^{-1}, Gr \equiv V \left(\frac{\partial p}{\partial U}\right)_V. \quad (4.8)$$

Известно, что знакопостоянство вторых производных, а также ряда комбинаций с участием смешанных производных от термодинамического потенциала, играет особую роль в проблеме устойчивости термодинамического равновесия (УТР). Это знакопостоянство связано с геометрической трактовкой условий термодинамической устойчивости в терминах выпуклости и вогнутости термодинамических потенциалов, как функций своих естественных переменных.

4.1.5 Безразмерные термодинамические комплексы (БТК)

БТК играют важную роль в термодинамическом описании плазмы в силу своей информативности. Сама величина этих БТК служит в слабонеидеальной газовой плазме указателем на степень завершенности той или иной реакции ионизации, молекулярных или фазовых превращений (см. ниже). Факт же постоянства некоторых БТК может служить индикатором близости термодинамического поведения НТП к идеальноегазовому в одном из вариантов понимания этого термина. Например, идеальный газ ядер и электронов, идеальная однократно ионизованная плазма, идеальный газ атомов, идеальный газ молекул и т.д. В термодинамическом описании свойств НТП полезны следующие БТК:

- Безразмерная характеристика термического УРС невырожденной НТП - так называемый фактор сжимаемости \mathcal{Z} (например, нормированный на идеальный газ атомов, где $\mathcal{Z} = 1$) и его обобщение на случай произвольного вырождения - \mathcal{Z}^* :

$$\mathcal{Z} \equiv \frac{pV}{RT} \equiv \frac{p}{n_{\text{ядер}} kT}, \quad \mathcal{Z}^* \equiv \frac{p}{p^{(\text{ид})}(n_{\text{ядер}}, T) + p^{(\text{ид})}(n_{\text{эл}}, T)}. \quad (4.9)$$

- Аналогичная характеристика калорического уравнения состояния, U/NkT , а также БТК усеченного калорического УРС, полезный в гидродинамических приложениях, и его обобщение на случай вырождения электронов:

$$\mathbf{G} \equiv \frac{U}{pV}, \quad \mathbf{G}^* \equiv \frac{U}{U^{(\text{ид})}(n_{\text{ядер}}, T) + U^{(\text{ид})}(n_{\text{эл}}, T)}. \quad (4.10)$$

Практическая полезность указанных калорических БТК в двух последних случаях зависит от удачного выбора нуля отсчета внутренней энергии. Среди вариантов такого выбора в посвященных термодинамике НТП теоретических работах, в зависимости от степени прикладного характера исследования, часто используются следующие три:

- А) способ, принятый в традиционной химической термодинамике, апеллирующий к т.н. стандартному состоянию (жидкому, твердому или газообразному) любого вещества (см.подробнее справочник: [43],
- В) методически наглядный выбор в качестве нуля отсчета состояния при $T = 0$ идеального газа элементарных (бесструктурных) частиц - ядер и электронов,
- С) промежуточный, более удобный для теоретического рассмотрения НТП, выбор в качестве нуля отсчета энергии состояния при $T = 0$ идеального газа атомов.

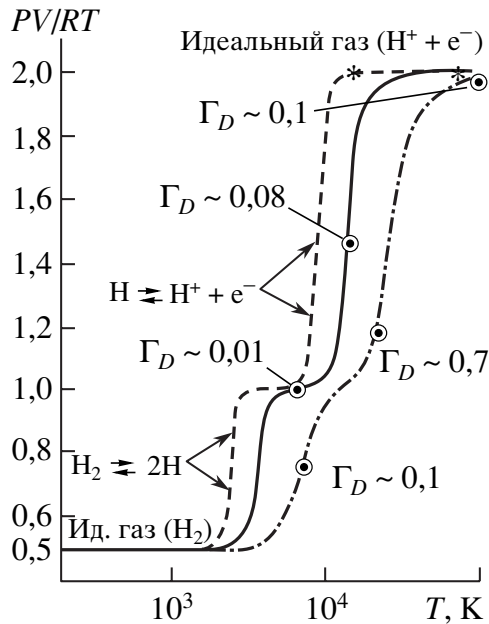


Рис. 4.1: Термическое уравнение состояния водорода

На рис. 4.1 представлен фактор сжимаемости pV/RT термического уравнения состояния НТП водорода в зависимости от температуры при пересечении полос ионизации и диссоциации по изобарам $p = 0.1$ кПа (штрих), $p = 0.1$ МПа (сплошная), $p = 100$ МПа (штрих-пунктир) по результатам расчета в приближении слабонеидеальной смеси $H_2 + H + H^+ + H_2^+ + H^- + e^-$ (Код SANA-IV [32]).

Показаны участки диссоциации ($H_2 \leftrightarrow 2H$) и ионизации водорода ($H \leftrightarrow H^+ + e^-$), а также участки полностью ионизованного идеального газа $H^+ + e^-$ ($pV/RT = 2.0$) и квазиидеального молекулярного водорода ($pV/RT = 0.5$). Отмечены границы участка слабой кулоновской неидеальности, $\Gamma = 0.1$ на изобаре $P = 100$ МПа и $\Gamma = 0.01$ на изобаре $p = 0.1$ МПа (стрелка 1 и стрелка 2), а также точки максимального значения параметра Γ . На изобарах $p = 0.1$ кПа и 0.1 МПа отмечена граница заметного вклада равновесного излучения в термодинамические функции (звездочки). Отчетливо видны участки диссоциации ($H_2 \leftrightarrow 2H$) и ионизации водорода ($H \leftrightarrow H^+ + e^-$), а также участки полностью ионизованного идеального газа $H^+ + e^-$ ($pV/RT \cong 2,0$) и квазиидеального молекулярного водорода ($pV/RT \cong 0,5$). На изобаре $p = 0,1$ кПа просматривается ограниченный участок квазиидеального газа атомов ($pV/RT \cong const = 1.0$).

На рис. 4.2 представлено калорическое уравнение состояния НТП водорода. Отмечены три идеальногогазовые асимптотики, $U = (3/2)pV + const$, и участки перехода между ними (ионизации и диссоциации):

- 1) $U = (3/2)pV + N_H R u$ - идеальный газ протонов и электронов ($H^+ + e^-$),

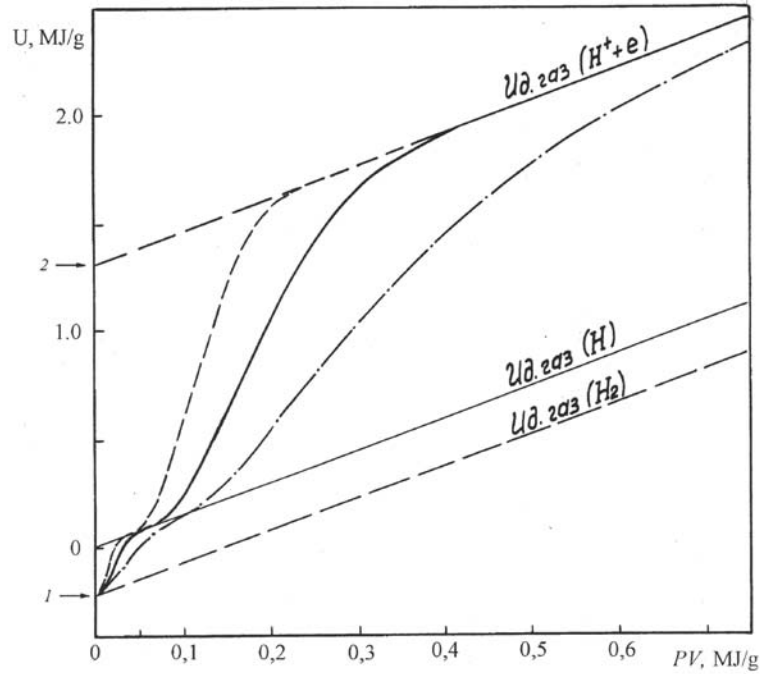


Рис. 4.2: Калорическое уравнение состояния НТП водорода $U(p, V)$ при пересечении полос ионизации и диссоциации по изобарам: $p = 0.0001$ МПа (штрих), $p = 0.1$ МПа (пунктир), $p = 100$ МПа (штрих-пунктир). По результатам расчета в приближении слабонеидеальной смеси $H_2 + H + H^+ + H_2^+ + H^- + e^-$ (Код САНА-IV [32]). Отмечены линии, соответствующие трем типам идеально-газового поведения, $U = 3/2pV + const$. Стрелки на оси ординат: а - $U/N = (D_2/2) \approx 2.24$ эВ/атом, б - $U/N = I_1 \approx 13.6$ эВ/атом.

- 2) $U = (3/2)pV$ - идеальный газ атомов H ,
- 3) $U = (3/2)pV - N_{H_2}D_{H_2}$ - идеальный газ молекул H_2 .

Среди набора безразмерных дифференциальных характеристик в термодинамическом описании "газовой" плазмы оказываются полезными и широко используются безразмерные логарифмические производные (показатели): $\gamma_T, \gamma_S, (\partial \ln p / \ln T)_V, Gr$ и др. Близость этих БТК к постоянному значению, например $\gamma_T \approx 1.0, \gamma_S \approx 5/3, Gr \equiv (\partial pV / \partial U)_V \approx 2/3$ и т.д., служит признаком идеального газовых черт в термодинамическом поведении НТП.

4.1.6 Корреляционные функции (КФ)

Основу этого уровня описания свойств НТП составляют s -частичные функции распределения (ФР) $F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$, имеющие физический смысл вероятности взаимного расположения группы из одной, двух, трех и т.д. частиц в точках $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s$. ФР нормируются таким образом, чтобы в предельном случае не взаимодействующей (не коррелированной) системы любая ФР тождественно равнялась единице. ФР просто определяются в случае системы взаимодействующих классических частиц:

$$F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s) \equiv \frac{V^s}{Q_N} \int_V \dots \int_V \exp\{-\beta U_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)\} d\mathbf{x}_{s+1}, \dots, d\mathbf{x}_N. \quad (4.11)$$

Аппарат КФ естественно обобщается на случай многокомпонентной системы.

Корреляционные функции являются экспериментально наблюдаемыми величинами, поддающимися измерению в экспериментах по нейтронному, ультразвуковому и оптическому рассеянию и др. Как величины, имеющие смысл вероятности, ФР всегда положительны. "Старшие" и "младшие" ФР связаны условиями нормировки, выражающими любую "младшую" ФР через старшую. ФР подчиняются принципу ослабления корреляций, выражающему тот факт, что при разбиении системы с частиц на две группы и взаимном удалении этих групп на далекие расстояния, соответствующая функция распределения $F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ стремится к произведению двух "младших" ФР, описывающих корреляции только внутри каждой из групп:

$$F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s) \rightarrow F_m(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m)F_k(\mathbf{x}_{m+1}, \dots, \mathbf{x}_{m+k}), \quad (4.12)$$

где

$$s = m + k, \quad \min |\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{x}_\beta| \rightarrow \infty \quad (\alpha = 1, \dots, m, \beta = m + 1, \dots, m + k).$$

С указанным свойством связана полезность введения наряду с ФР $F_s(x_1, \dots, x_s)$ дополнительно т.н. групповых корреляционных функций (КФ) - $U_s(x_1, \dots, x_s)$.

$$F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \equiv F_1(\mathbf{x}_1)F_1(\mathbf{x}_2) + U_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (4.13)$$

$$F_3(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) \equiv F_1(\mathbf{x}_1)F_1(\mathbf{x}_2)F_1(\mathbf{x}_3) + F_1(\mathbf{x}_1)U_2(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3) + F_1(\mathbf{x}_2)U_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_3) + F_1(\mathbf{x}_3)U_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + U_3(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3), \quad (4.14)$$

Корреляционные функции $U_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ стремятся к нулю при $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k| \rightarrow \infty$ ($i, k = 1, \dots, s$).

Среди семейства ФР важную роль играют две младшие - одно- и двухчастичная (бинарная) ФР. В однородной системе, в отсутствие внешнего потенциала, корреляции в системе создаются за счет бинарно-аддитивного взаимодействия, описываемого потенциалом $V(r)$, зависящим лишь от расстояния между частицами. В этом случае одночастичная ФР - $F_1(\mathbf{x}_1)$ тождественно равна единице, а главные носители структурной информации о корреляциях в системе - бинарные ФР и КФ - зависят только от расстояния между частицами и носят название радиальной функции распределения (РФР) и радиальной корреляционной функции (РКФ):

$$F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = F_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \equiv g(r),$$

$$U_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = U_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \equiv h(r) = g(r) - 1. \quad (4.15)$$

На рис. 4.3 представлен характерный вид зависимости радиальной функции распределения от межчастичного расстояния для простейшей однокомпонентной модели плазмы (ОКП) различных значениях параметра неидеальности модели $\Gamma \equiv Z^2 e^2 (4\pi n/3)^{1/3} / kT$. Цифры около кривых - значение параметра неидеальности Γ .

Знание функций распределения $F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ позволяет непосредственно вычислять средние от сумматорных макроскопических величин, представляемых суммой

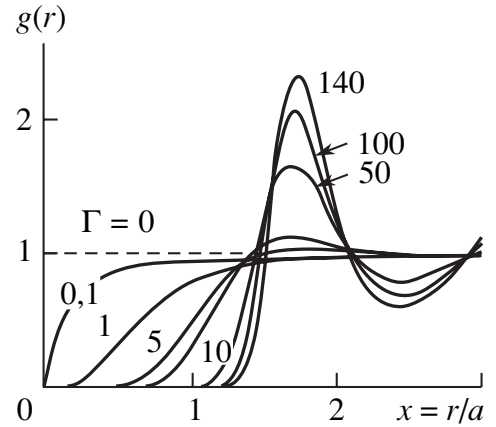


Рис. 4.3: Изменение бинарной корреляционной функции в модели ОКП с ростом неидеальности ($\Gamma \rightarrow \infty$) [171].

вкладов, зависящих от координат одной, двух и т.д. частиц. Главными из таких величин являются, например, внутренняя энергия и давление, выражаемые через РФР и потенциал межчастичного взаимодействия $V(r)$:

$$U(N, V, T) \equiv \langle U_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \rangle = \langle \sum_{(i,j)} V_{i,j}(r_{i,j}) \rangle = \frac{N^2}{2V} \int V(r)g(r)d\mathbf{r}, \quad (4.16)$$

$$\Delta p(n, T) \equiv \langle \sum \mathbf{x}_i \frac{dU_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)}{d\mathbf{x}_i} \rangle = - \left(\frac{n^2}{6} \right) \int r \frac{dV(r)}{dr} g(r) d\mathbf{r}. \quad (4.17)$$

Что касается остальных термодинамических величин, прежде всего энтропии и химического потенциала, их связь с КФ более сложна. Они не выражаются непосредственно через КФ посредством простых соотношений типа (4.16), (4.17), а требуют проведение дополнительного интегрирования, например, внутренней энергии, как функции фиктивно включаемого взаимодействия $V(r, \lambda) \equiv \lambda V(r)$, $\lambda \rightarrow 1$ ($0 < \lambda < 1$):

$$F(N, V, T) = F_{ид} + \int_0^1 d\lambda \frac{U(N, V, T, \lambda)}{\lambda} = F_{ид} + \frac{N^2}{2V} \int_0^1 d\lambda \int V(r)g(r, \lambda) d\mathbf{r}. \quad (4.18)$$

Вместе с тем эти величины ($S, F, \mu \dots$) могут быть выражены в виде бесконечной последовательности членов, представляющих собой интегралы от комбинаций, составленных из одной, двух, трех и более $F_2(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$. Различные варианты частичного суммирования этого ряда, с отбрасыванием части членов, приводят к приближенным функциональным зависимостям $S(\{F_2(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)\})$, которые в сочетании с вариационным принципом статистической механики приводят к эффективным приближениям, традиционно выражаемым в виде интегральных уравнений для $F_2(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)$. Наиболее известным из них является "гиперцепное приближение" (CHNC) (см., например, [142]).

Корреляционные функции $F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ играют важную роль в описании флуктуаций макроскопических величин. В частности, в однокомпонентном случае, среднеквадратичная флуктуация числа частиц $\langle (\Delta N_V)^2 \rangle$ в некотором фиксированном объеме V выражается через бинарную РФР - $g(r)$:

$$\frac{\langle (\Delta N_V)^2 \rangle}{N_V} = \{1 + n \int_V [g(r) - 1] d\mathbf{r}\} = \left(\frac{kT}{n} \right) \left(\frac{\partial n}{\partial \mu} \right)_T = (kT) \left(\frac{\partial n}{\partial p} \right)_T. \quad (4.19)$$

С корреляционной функцией $h(r)$ непосредственно связан ряд важных структурных характеристик. Одна из них - статическая диэлектрическая проницаемость - ϵ_k , которая для простейшего случая однородной смеси классических зарядов $\{Z_i\}$ ($i = 1, \dots, \nu$) связана в фурье-представлении с корреляционными функциями $\tilde{g}_{ij}(k)$ соотношением

$$(\epsilon_k)^{-1} = 1 - \left(\frac{k_D}{k} \right)^2 \left\{ 1 + \left[\frac{\sum_{i,j=1}^{\nu} n_i n_j Z_i Z_j \tilde{g}_{ij}(k)}{\sum_{i=1}^{\nu} n_i Z_i^2} \right] \right\}, \quad (4.20)$$

где квадрат дебаевского волнового числа равен

$$k_D^2 \equiv r_D^{-2} = 4\pi \sum_{(i=1.. \nu)} \frac{Z_i^2 e^2}{kT}.$$

Важным свойством плазмы, как проводящей системы с кулоновским (на далеких расстояниях) взаимодействием между зарядами, является предельное (при $k \rightarrow 0$)

свойство статической диэлектрической проницаемости $(\tilde{\varepsilon}_k)^{-1} \rightarrow 0 (k \rightarrow 0)$ Это свойство непосредственно связано с длинноволновой асимптотикой корреляционных функций в плазме и может быть наглядно проиллюстрировано на примере модели однокомпонентной плазмы на компенсирующем фоне (см., например, [171]):

$$(\tilde{\varepsilon}_k^{-1} = 1 - \left(\frac{k_D}{k}\right)^2 [1 + n\tilde{h}(k)] \Rightarrow n\tilde{h}(k) \sim -1 + \left(\frac{k}{k_D}\right)^2 + O(k^4) \rightarrow 0 (k \rightarrow 0). \quad (4.21)$$

Предельные свойства КФ плазмы в фурье-представлении эквивалентны интегральным условиям, наложенным на КФ (4.15). Первое из них носит название условия локальной электронейтральности или условия "нулевого момента" (4.22) и имеет физический смысл условия точного равенства заряда экранирующего облака, окружающего в среднем любой погруженный в плазму заряд, величине этого заряда (со знаком минус). Вторым является т.н. условие полного экранирования или условие "второго момента" (4.23), обеспечивающего выполнение (4.20). Для случая однокомпонентной плазмы оба условия имеют вид:

$$n \int [g(r) - 1] d\mathbf{r} \equiv n \int h(r) d\mathbf{r} = -1, \quad (4.22)$$

$$n \int [g(r) - 1] r^2 d\mathbf{r} \equiv n \int r^2 h(r) d\mathbf{r} = -(6r_D^2). \quad (4.23)$$

С использованием КФ для вычисления термодинамических свойств связана проблема термодинамической согласованности теоретических приближений. Дело в том, что по известной КФ термодинамические функции вычисляются не единственным образом. Например, поправка к давлению может быть вычислена тремя способами:

- непосредственно с использованием соотношения (4.17) (формула вириала),
- с использованием формулы для сжимаемости (4.19) с последующим интегрированием по плотности от идеального газового предела ($n \rightarrow 0$),
- через формулу для энергии (4.16) с последующим дифференцированием по V .

При использовании точной КФ все три варианта приводят к совпадающим результатам. Однако это, как правило, не так при использовании приближенной КФ. В связи с этим плодотворным оказался подход, когда при построении приближенного описания равновесных свойств в выражении для приближенной КФ предусматривается степень свободы (параметр), подбираемый впоследствии, исходя из требования равенства различных вариантов вычисления давления через КФ. Опыт показывает, что получаемые таким образом модификации тех или иных асимптотических приближений обладают лучшими экстраполяционными свойствами в области сильной неидеальности.

4.1.7 Структурные характеристики

Важной характеристикой НТП является структурный фактор $S(r)$. Он связан с бинарной КФ соотношением

$$S(r) = \delta(r) + nh(r) \Leftrightarrow S_k = 1 + nh_k = S(k) = \left(\frac{1}{N}\right) \langle \delta n(k) \delta n(-k) \rangle_{\Omega}. \quad (4.24)$$

Семейству корреляционных функций $F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ и $U_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ сопутствуют и другие структурные характеристики, среди которых особое место занимают два набора связанных с ними s -частичных величин - корреляционных потенциалов (потенциалов средней силы) $\Psi_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ и прямых корреляционных функций $C_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$. Особую роль в термодинамическом описании играют бинарные (двух-частичные) представители этих семейств, которые в практически наиболее важном случае однородной системы имеют вид

$$\Psi_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) \equiv -kT\psi(r) = -kT \ln\{g(r)\}, \quad (4.25)$$

$$c(r) \equiv C_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) = h(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|) + n \int h(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3|) \cdot C_2(|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2|) d\mathbf{x}_3. \quad (4.26)$$

Последнее соотношение может рассматриваться как определение функции $C_2(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|)$, носит название уравнения Орнштейна-Цернике. Оно приобретает простой вид при использовании фурье-представления для $c(r)$ и $h(r)$.

$$\tilde{c}_k = \tilde{h}_k / (1 - n\tilde{h}_k), \quad (4.27)$$

где фурье-компоненты определяются соотношениями:

$$y_{\mathbf{k}} \equiv \int y(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad y(\mathbf{r}) \equiv (2\pi)^{-3} \int y_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d\mathbf{k}.$$

Величины $\psi(r)$ и $c(r)$ полезны в термодинамическом описании неидеальных систем. Так при использовании разложения по малому параметру возможно асимптотически эквивалентное приближенное представление зависимости от потенциала межчастичного взаимодействия $V(r)$ для любой из трех функций - $g(r)$, $\psi(r)$ или $c(r)$. При этом при использовании приближения для $\psi(r)$ автоматически обеспечивается положительность $g(r)$, а при использовании приближения для $c(r)$ - правильная нормировка $h(r)$, тесно связанная с условием локальной электронейтральности (4.22), (4.23). Одновременное же соблюдение обоих этих условий является, как показывает опыт, действенным средством для конструктивного улучшения экстраполяционных свойств асимптотических приближений. В частности, такое одновременное выполнение может объяснить успех так называемого "гиперцепного" приближения (см. ниже), показавшего себя эффективным в описании классических кулоновских систем.

4.1.8 "Гиперприближения" для корреляционных функций

В теории простых жидкостей [133] успешно используется подход, который условно может быть назван "гиперприближением", (гиперцепное приближение (CHNC), приближение Перкуса-Йевика (PY) и их модификации [133] [93] и др.) Основу подхода составляет частичное суммирование старших членов диаграммного разложения КФ по потенциалу взаимодействия $V(r)$. Итеративная диаграммная структура ("сверх-переплетающаяся цепи") порождаемая гиперприближением, хорошо просматривается из анализа точных соотношений, связывающих четыре упомянутые выше бинарные характеристики: $V(r)$, $h(r)$, $c(r)$ и $\psi(r)$. В однокомпонентном случае эти соотношения могут быть выражены в симметричной форме:

$$\beta V(r) = -\psi(r) + \mathbf{S}\{c(r)\} + B(r) \approx -\psi(r) + \mathbf{S}\{c(r)\}, \quad (4.28)$$

$$\beta V(r) = -c(r) + \mathbf{P}\{\psi(r)\} + B(r) \approx -c(r) + \mathbf{P}\{\psi(r)\}. \quad (4.29)$$

Здесь $\beta \equiv 1/kT$, а $\mathbf{S}\{X\}$ и $\mathbf{P}\{X\}$ - операторы последовательного ("цепного") и параллельного ("лестничного") суммирования:

$$\mathbf{S}\{X(r)\} \equiv X * X + X * X * X + X * X * X * X + \dots \Leftrightarrow \mathbf{S}\{\tilde{X}_k\} \equiv \tilde{X}_k \cdot \left[\frac{\tilde{X}_k}{(1 - \tilde{X}_k)} \right],$$

$$\mathbf{P}\{X(r)\} \equiv \frac{1}{2!}X^2 + \frac{1}{3!}X^3 + \frac{1}{4!}X^4 + \dots = \exp\{X(r)\} - 1 - X(r),$$

$$X * Y \equiv n \int X(|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3|) \cdot Y(|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2|) d\mathbf{x}_3.$$

Форма (4.28), (4.29) подчеркивает класс диаграмм, поддающийся явному учету в рамках "гиперцепного" приближения (CHNC), соответствующего приближению $B(r) = 0$ и приводящего к замкнутому интегральному уравнению (см. напр. [133], [93]). Остающаяся т.наз. "мостовая" часть ("bridge functional" - $B[V(r)]$) есть сумма специального класса неприводимых диаграмм в диаграммном представлении БКФ $g(r)$ как функционала от $V(r)$. Ключевым моментом для всего класса гиперприближений является возможность представления $B[V(r)]$ как точного функционала от корреляционной функции $B = B[g(r)]$, представленного суммой т.н. "элементарных" диаграмм. Многочисленные (и успешные) попытки улучшить гиперцепное приближение (см. напр. [109] [269] [270] [211] и др.) связаны с поиском приближенной формы для этого функционала $B[g(r)]$.

Формулы (4.28) и (4.29) полезны не только для иллюстрации прямой процедуры вычисления БКФ по заданному потенциалу: $V(r) \Rightarrow g(r)$, но и для обратной, когда потенциал $V(r)$ ищется по экспериментально измеренной БКФ: $g(r) \Rightarrow V(r)$. При этом "стартовое" упрощенное приближение CHNC (с опущенной "мостовой" частью $B(r)$ [93]) может быть заметно усилено при использовании той или иной приближенной формы функционала $B[g(r)]$ (см. напр. [272]) или в рамках более громоздкой итеративной процедуры (схема "предиктор-корректор" [235]). Проблема обращения корреляционной функции [93] требует осторожности, так как принадлежит к классу некорректных задач. Попытки ее решения для плазмы затрагивают ряд сопутствующих проблем таких, как проблема единственности решения, корректного восстановления недостающего, как правило, экспериментально измеренного участка корреляционной функции на далеких расстояниях ("хвоста" КФ), проблемы неаддитивности получаемого эффективного парного потенциала и его зависимости от термодинамических параметров. Круг обсуждаемых проблем приобретает особую остроту для систем с кулоновским взаимодействием, а также для систем, где взаимодействие носит характер эффективного и многочастичного (непарного), как например, в "пылевой плазме" [161] и др.

4.2 Область неидеальности в фазовой диаграмме

Характеристику общей структуры термодинамических зависимостей НТП полезно представить в рамках общей картины термодинамических зависимостей вещества в целом. Наиболее традиционным для этого является представление в координатах плотность - температура (температура - массовая плотность, либо температура -

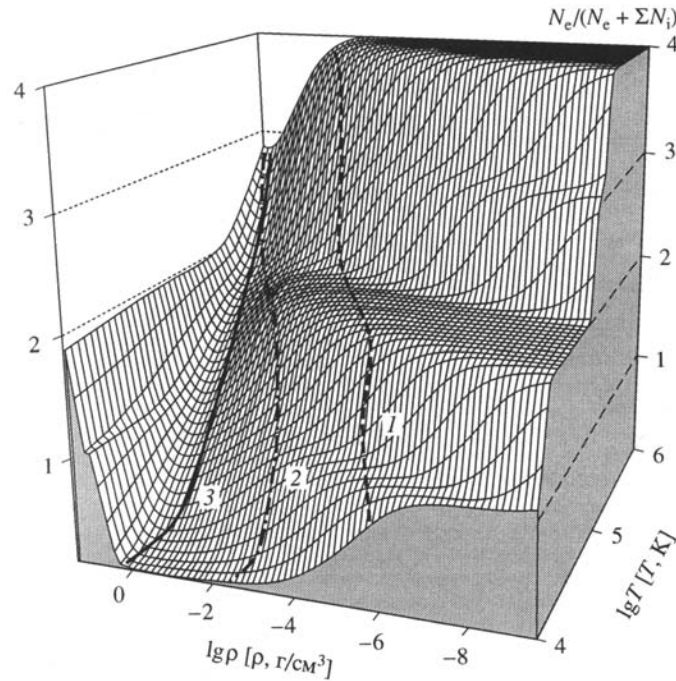


Рис. 4.4: Термическое уравнение состояния плазмы бериллия(Код SANA-IV [41])

парциальная плотность "свободных" электронов). Результаты теоретических оценок и многочисленных приближенных расчетов показывают, что фазовая диаграмма вещества может быть достаточно отчетливо разделена на две полубесконечные области с существенно различающимся характером термодинамического поведения в пределах каждой из них.

Одна из этих областей соответствует пределу относительно высоких температур и/или достаточно низких плотностей. Вторая, напротив, соответствует достаточно высоким плотностям, своим для каждой температуры. Две указанные подобласти дополняются разделяющей их переходной зоной, тем более обширной, чем ниже температура вещества. На рис. 4.4 представлена приближенная картина термического УРС НТП бериллия ($Z = 4$) в зависимости от плотности (ρ) и температуры (T). Расчеты проделаны в рамках одного из приближений обобщенной ХМП для смеси $e, Be, Be^+ \div Be^{+4}$ с использованием кода "SANA-IV" [32], [31]).

Та же качественная картина, соответствующая плазме алюминия ($Z = 13$), представлена на рис. 4.5. (Степень ионизации плазмы алюминия высокой плотности (область "ионизации сжатием") как функция температуры и степени сжатия плазмы, $\sigma = \rho/\rho_0$ ($\rho_0 = 2,69 \text{ г/см}^3$ - плотность Al при нормальных условиях). По результатам расчета в усовершенствованной статистической модели Томаса-Ферми (см. III.1.4 [160])). В этой модели акцент сделан на поведении термодинамических величин в области сжатой и сверхсжатой плазмы ($\rho \gg 1$). Рисунок соответствует расчетам, проделанным с использованием усовершенствованной модели Томаса-Ферми (УТФ) в рамках ячеечного подхода к описанию термодинамики НТП.

Как видно из рис. 4.4, в плазменной области условная граница между этими двумя областями по существующим представлениям приблизительно соответствует линии вырождения свободных электронов ($n_e \lambda_e^3 \sim 1$) (n_e - плотность свободных элект-

тронов, λ_e - тепловая длина волны де-Бройля для электрона), так что первая область соответствует условию - $n_e \lambda_e^3 \ll 1$ - невырожденная НТП, а вторая - $n_e \lambda_e^3 \gg 1$ - вырожденная. (Менее распространенной является терминология деления на "газовую" и "конденсированную" плазму).

Каждая из двух указанных областей существования НТП содержит на своей периферии в качестве предельной обширную идеальную область, термодинамика которой полностью известна. В первом случае это полностью ионизованная идеальная плазма классических ядер и электронов. Во втором - это идеальный газ полностью вырожденных ядер и электронов. Таким образом, состояние идеального газа ядер и электронов (вырожденного или невырожденного) достигается в любом из трех предельных переходов:

1. Термическая ионизация ($T \rightarrow \infty, \rho = const$), (4.33-a)
2. Ионизация разрежением ($T = const, \rho \rightarrow 0$), (4.33-b)
3. Ионизация давлением ($T = const, \rho \rightarrow \infty$). (4.33-c)

Все, что находится вне указанных предельных областей, является, в широком смысле слова, областью неидеальной плазмы, то есть областью, где поведение термодинамических зависимостей явным образом отражает эффект кулоновского взаимодействия ядер и электронов. Такое деление фазовой диаграммы на идеальную и неидеальную области соответствует подходу, называемому физической моделью плазмы - ФМП. Количественно условная граница так определенных идеальноегазовых областей может быть выражена следующими неравенствами:

4.2.1 "Газовый" предел

При достаточно высоких температурах, когда средняя тепловая энергия электрона превышает потенциал ионизации последнего электрона I_Z ($kT \gg I_Z \equiv Z^2 Ry$), граница неидеальности ФМП дается условием малости параметра неидеальности плазмы классических зарядов Z :

$$\Gamma_{ZZ} \equiv \frac{Z^2 e^2}{kT a_{wZ}} \ll 1, \quad \text{где} \quad a_{wZ} \equiv \left(\frac{3}{4\pi n_Z} \right)^{1/3}. \quad (4.30)$$

При относительно низких температурах, когда выполняется противоположное неравенство ($kT \leq I_Z \equiv Z^2 Ry$), условная граница идеального газа классических ядер и электронов приближенно определяется равенством химического потенциала электрона потенциалу старшей ионизации I_Z , со знаком минус:

$$\mu_e \cong kT \cdot \ln \left\{ \frac{n_e \lambda_e^3}{2} \right\} \ll -I_Z \equiv -Z^2 \cdot Ry. \quad (4.31)$$

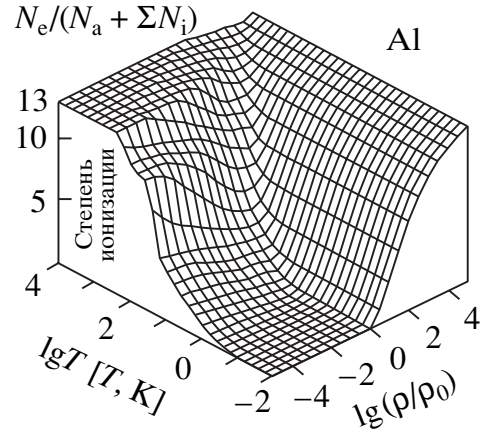


Рис. 4.5: Степень ионизации плотной плазмы алюминия ("ионизация сжатием" [85])

Следует подчеркнуть, что при выполнении условия (4.31) асимптотически главным членом, описывающим при $T = const$ и $n \rightarrow 0$ эффект неидеальности, является член $\sim n^{3/2}$, соответствующий дебаевскому приближению ("кольцевому") приближению в модифицированном разложении ТП по степеням активности. Вместе с тем в суммарном уравнении состояния численно превалирующим (из-за экспоненциальной зависимости от температуры $\sim \exp\{-I_Z/kT\}$) становится пропорциональный n^2 член, описывающий эффект локализации на ядре первого электрона.

4.2.2 Предел сверхплотной плазмы

Граница этого состояния дается условием малости средней энергии кулоновского взаимодействия ядер в сравнении с их средней кинетической энергией. Ввиду вырождения ядер это соответствует малости т.н. параметра Бракнера для ядерного компонента:

$$1 \gg r_s^{(Z)} \equiv \frac{a_{wZ}}{a_0^{(Z)}} \equiv a_{wZ} \cdot \left[\frac{M(Ze)^2}{\hbar^2} \right], \quad a_{wZ} \equiv \left(\frac{3}{4\pi n_Z} \right)^{1/3}, \quad (4.32)$$

где M , Ze и n_Z - масса, заряд и концентрация ядер.

Следует оговориться, что обсуждаемая граница неидеальности (4.32), вообще говоря, является формальной, поскольку предполагает неизменным состав плазмы при стремлении к пределу (4.32). В действительности при ультравысоких плотностях, соответствующих этому пределу, в реальном веществе, в частности в водороде (рис. 4.6) начинается активное протекание цепочки пикноядерных реакций синтеза протонов в более тяжелые ядра. Поведение вещества в таких условиях является объектом описания уже другой области физики (см. например [156]).

На рис. 4.6 представлена диаграмма плотность-температура для водорода. Справа - плотность, слева - полная концентрация протонов. Показано положение уровня суммарной плотности электронов, соответствующее значению параметра Бракнера $r_s = 1, 2$ и $4(r_s = a/a_0 = (3/4\pi n_e)^{1/3}/a_0)$. Обозначения: 1 - фазовый переход газ-жидкость в молекулярном водороде, 2 - граница плавления в молекулярном водороде согласно [90], TP и CP - тройная и критическая точки, PPT - гипотетический "плазменный фазовый переход" по [274] (CP - критическая точка), DPT - гипотетический диссоциативный фазовый переход в твердом водороде согласно [90], 3 - условный "центр" полосы диссоциации водорода ($x_{H_2} = x_H$), 4 - "центр" полосы ионизации ($x_H = x_{H^+}$), 4* - условная верхняя граница полосы ионизации в газовой плазме (степень делокализации электронов $\approx 95\%$), даваемая химической моделью плазмы (код "SANA-IV" [41]), 4** - условная граница квазиоднородности электронного газа в сверхплотной плазме (построено согласно результатам расчета [85] в ячеечной модели УТФ), 5 - предполагаемая зона вигнеровского кристалла протонов на фоне однородного вырожденного электронного газа, 5* - положение границы классического кристалла протонов ($\Gamma_{pp} \cong 180$) в пренебрежении их экранировки электронами, 5** - предполагаемая граница "холодного" плавления протонного кристалла $r_s^{(p)} \cong 100$ (согласно расчетам [178]), 6 - граница вырождения свободных электронов ($n_e \lambda_e^3 = 1$), 7 - граница вырождения протонов ($n_p \lambda_p^3 = 1$), 8 - граница кулоновской неидеальности ($8 - \Gamma = 1.0, 8^* - \Gamma = 0.1$), 9 - условная граница кулоновской неидеальности вырожденной подсистемы протонов ($r_s^{(p)} = 1$), 10 - граница релятивистских эффектов в

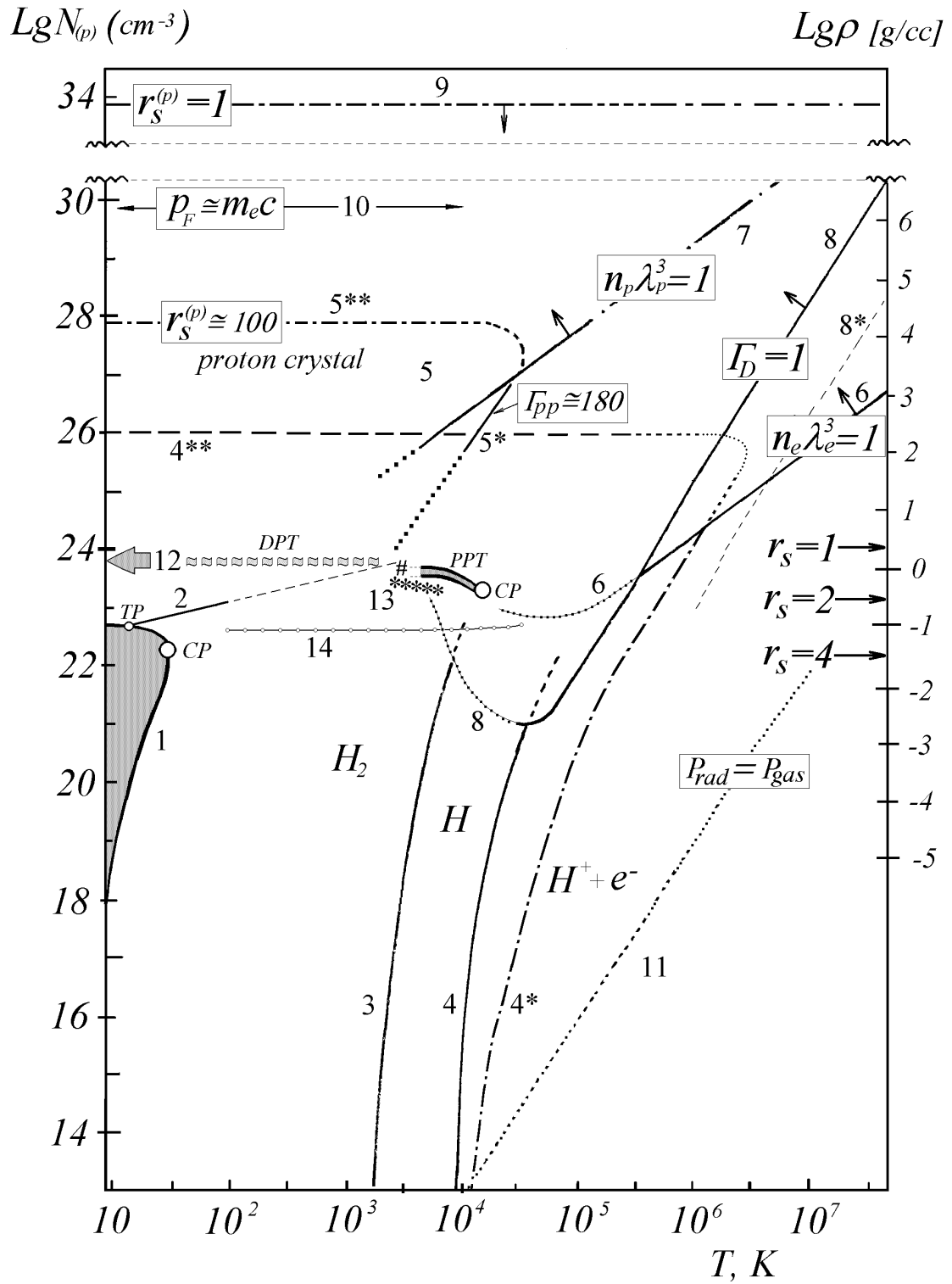


Рис. 4.6: Сводная фазовая ($\rho - T$) диаграмма водорода [72].

термодинамике вырожденных электронов, 11 - граница заметного вклада в уравнение состояния плазмы от равновесного излучения, 12 - оценка положения фазового перехода из молекулярной фазы в атомарную в твердом водороде, полученная по экспериментам по изэнтропическому сжатию водорода (Кормер и др., (ВНИИЭФ - 1972) [27]), 13 - зона резкой металлизации, зафиксированная при квазиизэнтропическом сжатии водорода в экспериментах Неллиса и др. (§) [248] и Тернового и др. (*) [151], 14 - условное "дно долины неидеальности" - положение минимумов внутренней энергии $U(T, \rho)$ на изотермах согласно расчетам в модифицированной химической модели плазмы (код SANA-IV [32], [41]).

Условие, определяющее границу неидеальности вырожденного электронного компонента, соответствует заметно меньшим плотностям:

$$1 \gg r_s^{(e)} \equiv \frac{a_{wZ}^{(e)}}{Z^{1/3}} a_0^{(e)} \equiv \left(\frac{3}{4\pi n_e} \right)^{1/3} \left[\frac{m_e e^2}{\hbar^2} \right]. \quad (4.33)$$

Таким образом, область неидеальной плазмы в терминологии ФМП может быть представлена на $\rho - T$ -диаграмме любого вещества некоторой "зоной неидеальности", окруженной с трех сторон областью идеальноевального состояния (7.25 ÷ 1.27) и ограниченной условными границами (7.28 ÷ 1.31). На $\rho - T$ -диаграмме водорода (на рис. 4.6) помимо границ вырождения ядерного и электронного компонентов, приведен также ряд других важных границ.

Из рисунков (4.4), (4.5), и (4.6) видно, что обсуждаемая зона неидеальности, которую иногда образно называют "долиной неидеальности" [69], [192], может быть довольно отчетливо, хотя и условно, разделена на "газовую" и "конденсированную" подобласти ("склоны") со своими масштабами и характерными деталями структуры термодинамических зависимостей. В каждой из этих подобластей доминирующим эффектом, проявляющимся по мере углубления в область неидеальности (изотермическое сжатие в газовой плазме и изотермическое снижение плотности в плазме "конденсированной") является эффект последовательной локализации электронов вокруг ядер, вплоть до перехода к состоянию нейтральной смеси атомов и молекул. Проявление этого эффекта в термодинамических свойствах НТП в пределах каждой из подобластей существенно различается. В данном разделе основное внимание уделено анализу структуры термодинамических зависимостей НТП в области разреженной "газовой" плазмы, а также в переходной области между двумя вышеназванными.

Описанная выше зона неидеальности, ограниченная условиями (4.30 - 4.32) достаточно обширна. Наше знание термодинамических свойств плазмы во всей этой зоне, строго говоря, является приближенным. Однако, согласно существующим представлениям, реальный диапазон параметров, где термодинамические свойства НТП могут быть воспроизведены с удовлетворительной точностью, намного превосходит диапазон параметров состояния идеальной плазмы ядер и электронов. Точнее, обширная область невырожденной газовой плазмы между границей полной ионизации плазмы до ядер и электронов и границей неидеальной плазмы, в традиционном понимании этого названия, (см.ниже) может быть уверенно описана в рамках химической модели плазмы (ХМП), дополненной учетом поправок, корректирующих идеальноевальные термодинамические функции [192], [32], [69], [31], [29]. Со стороны низких температур обсуждаемая область для большинства веществ замыкается границей конденсации насыщенных паров вещества $p(n, T) \leq p_s(T)$.

Вообще говоря, в число объектов описания термодинамических свойств газовой НТП входит граничащая с кривой насыщения область метастабильного газового состояния, расположенная между бинодалью и спинодалью газовой фазы (переохлажденный пар). Последняя (спинодаль) соответствует линии абсолютной термодинамической неустойчивости, т.е. в общем случае соответствует границе потери положительной определенности матрицы $||\partial\mu/\partial\mathbf{n}||$, что для однокомпонентного вещества соответствует равенству $(\partial p/\partial V)_T = 0$. Состояние метастабильной газовой НТП может быть реально достигнуто в динамических экспериментах, например, при изотропическом расширении ("разгрузке") плазмы, предварительно сжатой мощной ударной волной, или в ряде реальных прикладных динамических процессов (см. [54] [69] и разделы IV и VI [160]).

4.3 Термодинамика слабонеидеальной плазмы

Как сказано выше, в обширной области параметров НТП, ограниченной условиями $(n_e\lambda_e^3 \ll 1, \Gamma \ll 1, \gamma_{oz} \ll 1, \rho \ll \rho_c, p < p_s)$ термодинамические свойства невырожденной и слабонеидеальной НТП малой плотности могут быть достаточно уверенно описаны в рамках существующего формализма ХМП. Согласно результатам этого описания, основным структурообразующим элементом термодинамики такой НТП являются процессы диссоциации молекул и молекулярных ионов с последующей ионизацией атомов вплоть до полностью ионизованного состояния ядер и электронов $Z + e$. Считается, что уже приближенное описание НТП как идеальноегазовой смеси всех этих составляющих, содержит в себе главные структурные элементы, характерные для термодинамических зависимостей в области газовой плазмы и проявляющиеся тем отчетливее, чем ближе рассматриваемая плазма к пределу $\rho \rightarrow 0, T \rightarrow 0, \mu = const$ (см. ниже). В ХМП ионизационное и химическое равновесие описываются в рамках единого формализма - совокупности эквивалентных по структуре уравнений, описывающих процесс последовательной ионизации, образования и разрушения химических связей, дополненных условиями сохранения и баланса заряда, массы и пропорции химических элементов:

$$\frac{n_{Zi+1}n_e}{n_{Zi}} = K_i(T) \exp\left(-\frac{I_i}{kT}\right), \quad \frac{n_a n_b}{n_{ab}} = K_{ab}(T) \exp\left(-\frac{D_{ab}}{kT}\right). \quad (4.34)$$

На рис. 4.7: термическое уравнение состояния (pV/RT) плазмы натрия ($Z = 11$) при пересечении полос ионизации по изобарам: $p = 0.1$ кПа (штрих), $p = 0.1$ МПа (сплошная), $p = 100$ МПа (штрих-пунктир) по результатам расчета в модели ХМП (код SANA-IV) в приближении неидеальной смеси $Na^+ \div Na^{+11} + e^- + Na$ в пренебрежении вкладом равновесного излучения в области малых плотностей и высоких температур. Для сравнения приведены результаты сглаженного описания в ячеечном приближении Томаса - Ферми (ТФ) и Томаса - Ферми с поправками (ТФП) (по данным расчетов Н.Н.Калиткина и Л.В.Кузьминой [80]). На изобарах 0.1 и 100 МПа отмечены условные границы кулоновской неидеальности, $\Gamma = 0, 01, 0, 1, 1, 0$. Просматриваются участки квази-идеальногазового поведения ($pV/RT = const$): атомарного ($pV/RT = 1$) и однократно ионизованного, $Na^+ + e^-$ ($pV/RT = 2$), а также участки, соответствующие переходу к ионизации с внутренней К-оболочки ($pV/RT = 10$) и, наконец, полностью ионизованного состояния, $Na^{+11} + 11e^-$ ($pV/RT = 12$) (Рисунок из работы [65]).

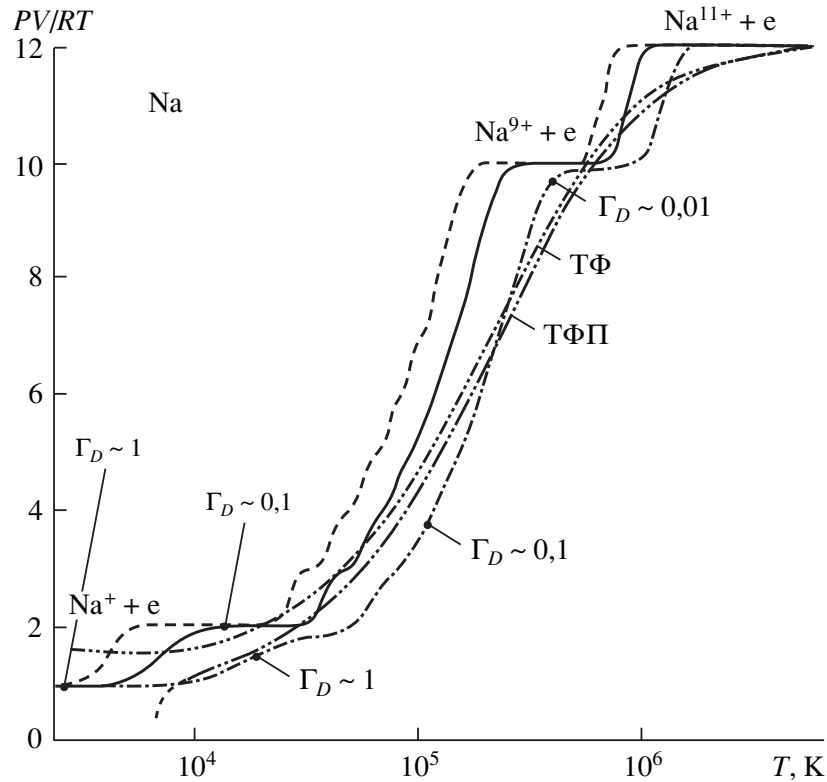


Рис. 4.7: Термическое уравнение состояния плазмы натрия [65].

Анализ решения полной системы уравнений вида (4.34) достаточен, чтобы уже в сочетании с идеально-газовым термическим и калорическим УРС обрисовать общую картину строения термодинамических зависимостей слабонеидеальной невырожденной НТП. Согласно этой картине вся обсуждаемая область параметров разбивается на совокупность последовательных "полос ионизации" (ПИ) и "полос молекулярных превращений" (ПМП), разделенных участками квазиидеальногазового поведения. Главной особенностью термодинамических зависимостей в этой области является их немонотонный, осциллирующий характер (на уровне уравнений состояния). Для обозначения обсуждаемых немонотонностей, проявляющихся особенно ярко при переходе между электронными оболочками атомов в процессе их последовательной ионизации, широко используется термин - оболочечные осцилляции. Расчеты и теоретический анализ показывают, что влияние различных механизмов неидеальности на указанные осцилляции в области невысоких степеней неидеальности сводится прежде всего к сглаживанию этих осцилляций [32].

Анализируя положение на $\rho - T$ диаграмме i -й полосы ионизации ($A^{(i-1)+} = A^{i+} + e^-$), можно в качестве её условной середины $\rho_i^*(T)$ (или $n_i^*(T)$) выбрать воображаемую линию равенства концентраций ионов двух последовательных кратностей ионизации, а в качестве условных границ - кривые, отвечающие достижению сте-

пенью i -й ионизации фиксированных значений, близких к 0 и 1.

$$\left. \begin{aligned} n^{i+} &= n^{(i-1)+} \equiv n_i^*(T) \equiv \rho_i^*(T)/m, \\ n_i''(T) &\leftrightarrow \left(n^{i+}/n^{(i-1)+} \right) = const \equiv \varepsilon (\varepsilon \ll 1), \\ n_i''(T) &\leftrightarrow " \left(n^{i+}/n^{(i-1)+} \right) = const \equiv 1 - \varepsilon. \end{aligned} \right\} \quad (4.35)$$

В рамках приближения идеальной смеси характеристики термического и calorического УРС непосредственно связаны с полной степенью ионизации α ($\alpha \equiv n_e/(n_a + \sum n_i)$) следующим образом:

$$\mathcal{Z} \equiv \frac{pV}{RT} = \frac{p}{(n_a + \sum n_i) kT} = 1 + \alpha. \quad (4.36)$$

4.3.1 Свойства термического уравнения состояния газовой НТП

Основные особенности $p - V - T$ - зависимостей в области слабонеидеальной газовой плазмы могут быть сведены к следующим утверждениям [61], [65], [72]:

1. Положение ПИ на $\rho - T$ диаграмме определяется прежде всего величиной соответствующего потенциала ионизации I_i . Логарифмический наклон ПИ монотонно растет с понижением температуры:

$$\ln \{ n_i^*(T) \lambda_e^3 \} \sim -\frac{I_i}{kT}, \quad \left(\frac{\partial \ln n_i^*(T)}{\partial \ln T} \right)_V \sim -\frac{I_i}{kT} \rightarrow \infty \text{ при } T \rightarrow 0.$$

2. С ростом температуры границы соседних ПИ сближаются и смыкаются. Участки идеального поведения ($pV/RT = const$, $U = 3/2pV + const$) исчезают. Квазиступенчатая структура поведения термического и calorического УРС сглаживается (см.рис. 4.1, 4.2). Момент, когда это происходит, существенно зависит от соотношения потенциалов ионизации. Эта структура проявляется особенно отчетливо, а участки квазиидеального поведения особенно обширны, когда процесс последовательной ионизации электронов переходит с ионизации одной оболочки на другую. Такой переход, как известно, сопровождается заметным разрывом между величинами соответствующих потенциалов ионизации. Показательным, например, в этом отношении является интервал перехода между первой и второй ионизациями щелочных металлов (см.рис. 4.7)
3. При пересечении изолированной ПИ ($A^{(i-1)+} = A^{i+} + e^-$) безразмерный показатель термического УРС - фактор сжимаемости $\mathcal{Z} \equiv pV/RT \equiv p/(n_{\text{ядер}} kT)$ - монотонно переходит от значения $\mathcal{Z} = 1 + (i - 1)$ до значения $\mathcal{Z} = 1 + i$.
4. Логарифмическая "ширина" ПИ, при ее пересечении вдоль любой линии, сопровождающейся изменением температуры (изохора, изобара, изоэнтропа и т.д.) - с понижением температуры монотонно стремится к нулю:

$$\delta \ln T^* \equiv \ln T' - \ln T'' \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow 0). \quad (4.37)$$

5. Если пренебречь эффектами неидеальности, то логарифмическая "ширина" i -й ПИ при ее изотермическом пересечении не зависит от температуры:

$$\delta \ln [n_i^*(T)] \equiv \ln [n_i'(T)] - \ln [n_i''(T)] \quad (T = const). \quad (4.38)$$

При этом форма этой волны фактора сжимаемости также не зависит от температуры и является универсальной функцией логарифма плотности. Изменение температуры приводит к автомодельному сдвигу этой волны вдоль координаты $-\ln \rho$ (см.рис. 4.4).

- Ввиду формальной эквивалентности в идеальном газе приближении уравнений химического и ионизационного равновесия все указанные выше особенности поведения термодинамических функций, проявляющиеся при пересечении изолированной ПИ, остаются в силе и для случая соответствующего пересечения полосы молекулярных превращений - ПМП, например, диссоциации водорода $H_2 = 2H$ (см.рис. 4.1, 4.2).

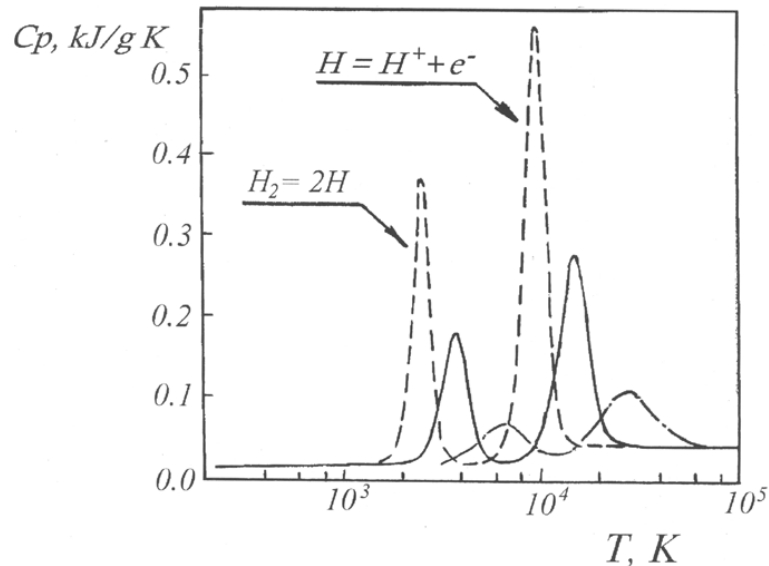


Рис. 4.8: Теплоемкость C_p , плазмы водорода при пересечении полос ионизации и диссоциации по изобарам: $p = 0.1$ кПа (штрих), $p = 0.1$ МПа (сплошная), $p = 100$ МПа (штрих-пунктир). Расчет смеси: $H_2 + H + H^+ + H_2^+ + H^- + e^-$ (код "SANA-IV" [32])

- Волнообразная структура термодинамических зависимостей НТП, на уровне уравнения состояния, эквивалентна характерной δ -образной либо зигзагообразной структуре на уровне дифференциальных термодинамических характеристик - теплоемкости, коэффициента Грюнайзена и т.д. Это показано на рис. 4.8 и 4.9 для НТП водорода. (Зависимость параметра Грюнайзена плазмы водорода от температуры при пересечении полос ионизации и диссоциации по изобарам: $p = 0.1$ кПа (пунктир), $p = 0.1$ МПа (штрих) и $p = 0.1$ ГПа (сплошная) по результатам расчета в приближении слабонеидеальной смеси $[H_2 + H + H^+ + H_2^+ + H^- + e^-]$ (код SANA-IV [32]).
- Изолинии $T = const$, $U = const$, $S = const$ и др., при пересечении изолированной ПИ или ПМП в области газовой НТП, имеют характерный изгиб, как например изображенный на рис. 4.10 изгиб в плоскости $pV \leftrightarrow \ln \rho$ (Качественное поведение изолиний $x = const$. [(а): $x = T, U, H$ и (б) $x = S$ (адиабата Пуассона)] в координатах $Ln(pV) \leftrightarrow LnV$ при пересечении изолированной полосы ионизации (штрих) и прилегающих идеально-газовых участков (сплошные линии) в

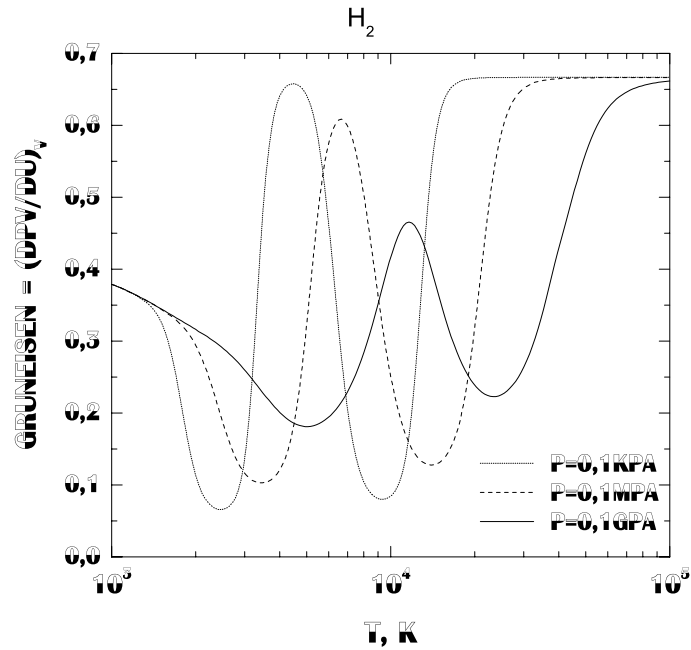


Рис. 4.9: Параметр Грюнайзена $\{Gr \equiv (\partial pV/\partial U)_V\}$ плазмы водорода при пересечении полос ионизации и диссоциации по изобарам: $p = 0.1$ кПа (пунктир), $p = 0.1$ МПа (штрих) и $p = 0,1$ ГПа (сплошная). Расчет для смеси $\{H_2 + H + H^+ + H_2^+ + H^- + e^-\}$ (код "SAHA-IV" [32])

условиях слабонеидеальной газовой плазмы [58], [32]).

В ряде прикладных вопросов существенно взаимное расположение указанных изолиний в процессе пересечения ПИ и ПМП. Это взаиморасположение, характерное для слабонеидеальной, невырожденной, разреженной НТП, схематично показано на рис. 4.12.

4.3.2 Свойства калорического уравнения состояния газовой НТП

Также как и термическое УРС, калорическое уравнение состояния газовой НТП приобретает все более и более отчетливую осциллирующую квазиступенчатую структуру по мере перехода к более низким плотностям и температурам ("ХМП-пределу").

Примечательно то, что при выборе в качестве изображаемой калорической величины внутренней энергии (либо энтальпии), за вычетом ее поступательной составляющей ($U - 3/2pV \equiv H - 5/2pV$), структура калорического уравнение состояния становится качественно почти идентичной соответствующей структуре термического УРС [32], [65]. Это показано на рис. 4.11. (Калорическое уравнение состояния плазмы лития в области газовой плазмы на изобарах ($P = 10^{-4}, 10^{-1}, 100$ МПа). По результатам расчета в приближении неидеальной смеси $Li + Li^+ + Li^{2+} + Li^{3+} + e^-$ в пренебрежении вкладом равновесного излучения в области малых плотностей и высоких температур (код "SAHA-IV" [65], [32]). Стрелки: 1 - $U/N = I_1 \cong 5,39$ эВ/атом, 2 - $U/N = I_1 + I_2 \cong 81,0$ эВ/атом, 3 - $U/N = I_1 + I_2 + I_3 \cong 203,4$ эВ/атом (полная энергия связи атома Li)).

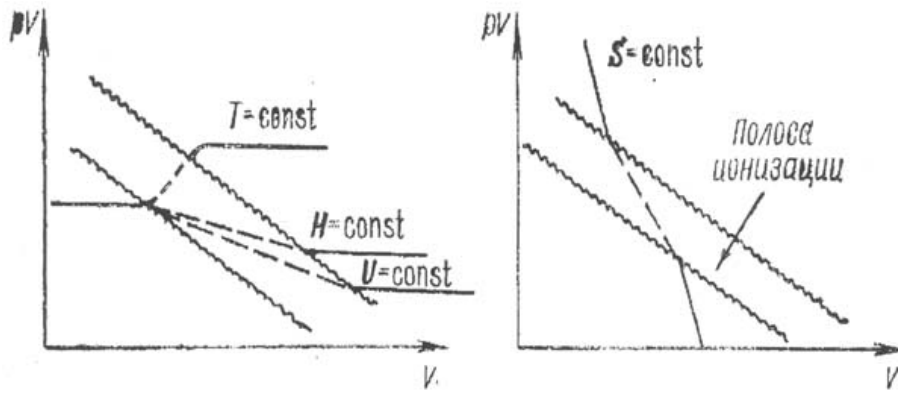


Рис. 4.10: Качественное поведение изолиний $x = const.$ {(а) : $x = T, U, H$ и (б) $x = S$ (адиабата Пуассона)} в координатах $Ln pV - Ln V$ при пересечении изолированной полосы ионизации (штрих) и прилегающих идеально-газовых участков (сплошные линии) в условиях слабонеидеальной газовой плазмы (рисунок из работы [106])

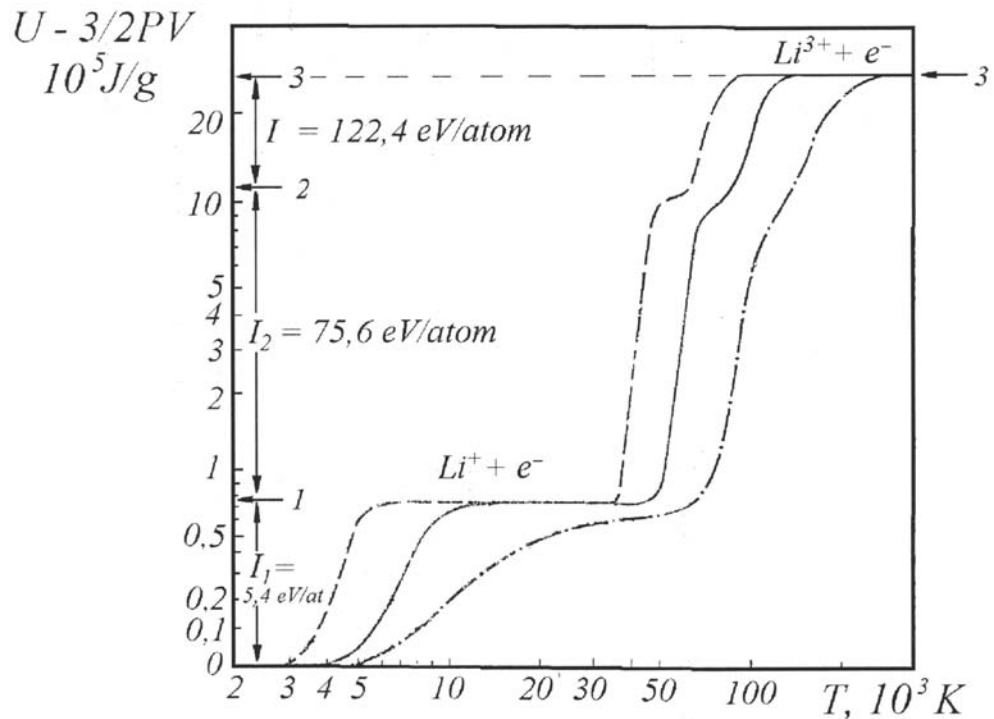


Рис. 4.11: Калорическое уравнение состояния плазмы лития в области газовой плазмы [65]

Следует подчеркнуть ряд существенных отличий:

1. Величина соответствующих "ступенек" в калорическом уравнении состояния $U - 3/2pV$ составляет уже не ± 1 , как в термическом УРС (рис. 4.1, 4.7), а равна величинам соответствующих потенциалов ионизации (или энергий диссоциации, если речь идет о полосе молекулярного превращения). Таким образом, эти количественные характеристики калорического уравнения состояния выступают как термодинамическое определение потенциалов ионизации (энергий диссоциации и т.д.) в качестве наблюдаемых величин. В стандартное термодинамическое описание эти величины вводятся из спектроскопических измерений, либо из приближенных квантовомеханических расчетов этих характеристик для изолированного атома, иона или молекулы.
2. Суммарный скачок величины $U - 3/2pV$, при его отсчете от идеального газа атомов (молекул), равен полной энергии связи атома (молекулы и т.д.). Любая теория, претендующая на количественное описание термодинамики НТП, включая асимптотики как идеального газа атомов (молекул), так и идеального газа ядер и электронов, обязана правильно воспроизвести величину этой энергии.
3. Калорическое УРС более чувствительно к влиянию возбужденных состояний комплексных частиц, чем термическое. Это отражается на структуре осциллирующих термодинамических зависимостей в пределах ПМП, когда существенна роль колебательных и вращательных возбуждений молекул. Их влияние заметно сглаживает обсуждаемую квазиступенчатую структуру калорического УРС.
4. В низкотемпературном "газовом" пределе ($\rho \rightarrow 0, T \rightarrow 0, \mu = const$) (см. ниже 4.20) изотермы газовой НТП в координатах U, pV вырождаются в ломаную, наклон которой в пределах каждой ПИ постоянен и определяется соответствующими потенциалами ионизации или энергией диссоциации.

Следует заметить, что в силу соображений размерности для систем (как классических, так и квантовых) с кулоновским потенциалом взаимодействия величина $\Pi \equiv U - 3/2pV \equiv H - 5/2pV$ есть ни что иное, как средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия, для которой справедлив ряд общих неравенств, в частности, отрицательность, $\Pi < 0$ (если отсчитывать ее от энергии системы невзаимодействующей ядер и электронов). Учитывая, что все вещества можно описывать как состоящие из ядер и электронов (физическая модель плазмы), сказанное фактически справедливо для любой конкретной НТП. Наряду с величиной Π в ряде случаев в отношении кулоновской системы полезно отдельно рассматривать величину средней кинетической энергии, $K \equiv 3pV - U = U - \Pi$, также подчиняющуюся ряду общих ограничений, начиная с очевидного, $K \geq 0$. К сожалению в большинстве прикладных

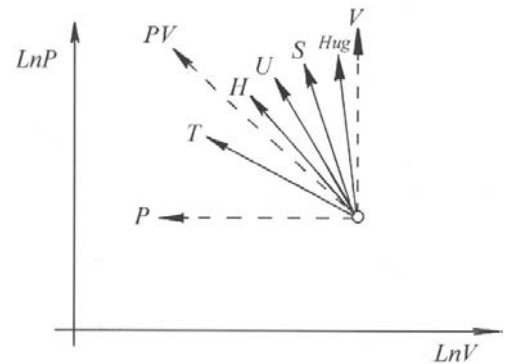


Рис. 4.12: Изолинии $x = const.$ ($x = p, T, U, H, S, V, Hug$) ("Hug" - адиабата Гюгонио) в координатах $Ln p - Ln V$ в пределах изолированной полосы ионизации [106]

ситуаций для реально интересных конкретных примеров НТП нас интересуют изменения величин K и Π , являющиеся малыми разностями на фоне больших величин, даваемых доминирующими вкладами в K и Π от основного числа глубоко связанных электронов. Исключением из этого правила являются случаи высокотемпературной плазмы легких элементов, прежде всего водорода (и его изотопов), где использование K и Π , наряду с U и pV , более эффективно.

Таким образом, основными структурными элементами, доминирующими в термодинамических зависимостях в области газовой НТП являются осцилляции термодинамических величин, связанные с пересечением полос ионизации и молекулярных превращений. Эти структуры качественно воспроизводятся в рамках приближения идеальной смеси химической модели плазмы и подвергаются дальнейшей деформации (сглаживанию или искажению) под действием эффектов неидеальности НТП, как за счет взаимодействия свободных зарядов, так и за счет деформации вклада связанных состояний под влиянием плотного плазменного окружения.

4.4 Предельная структура термодинамических зависимостей

Принципиальным для возможности удовлетворительного описания термодинамики НТП в области слабонеидеальной невырожденной газовой плазмы является то обстоятельство, что помимо трех, перечисленных выше идеальногогазовых пределов, в окрестности которых мы можем воспроизводить термодинамические свойства плазмы с необходимой нам точностью, используя ту или иную хорошо обоснованную теоретическую процедуру разложения по малому параметру, существует четвертый предел, с приближением к которому наше знание термодинамических свойств НТП также становится все более и более точным. Это предел бесконечно разреженной плазмы нулевой температуры ($T \rightarrow 0, \rho \rightarrow 0$). При специальном выборе координат [65] термодинамика вещества (плазмы) приобретает в этом пределе замечательную, предельно простую схематическую структуру, являющуюся прообразом реальной структуры термодинамических зависимостей газовой плазмы при $T > 0$.

4.4.1 Химический потенциал плазмы как управляющий параметр

Известно, что состояние $\{T = 0, \rho = 0\}$ является особой точкой термодинамического описания. Термодинамика плазмы в этом пределе существенно зависит от способа перехода к пределу.

$$\text{Lim}_{T \rightarrow 0} \text{Lim}_{\rho \rightarrow 0} \{A\} \neq \text{Lim}_{\rho \rightarrow 0} \text{Lim}_{T \rightarrow 0} \{A\}$$

Соответствующий предел (ниже используется термин "ХМП-предел") должен проводиться при фиксированном значении какого-либо химического потенциала, например, электрона, $\mu_e(\rho, T)$. Этот параметр становится в этом пределе основной определяющей термодинамической величиной. Роль такого "управляющего" термодинамического параметра может выполнять и химический потенциал атомов μ_a :

$$T \rightarrow 0, \quad \rho \rightarrow 0, \quad \mu_e(\rho, T) = \text{const.} \quad (4.39)$$

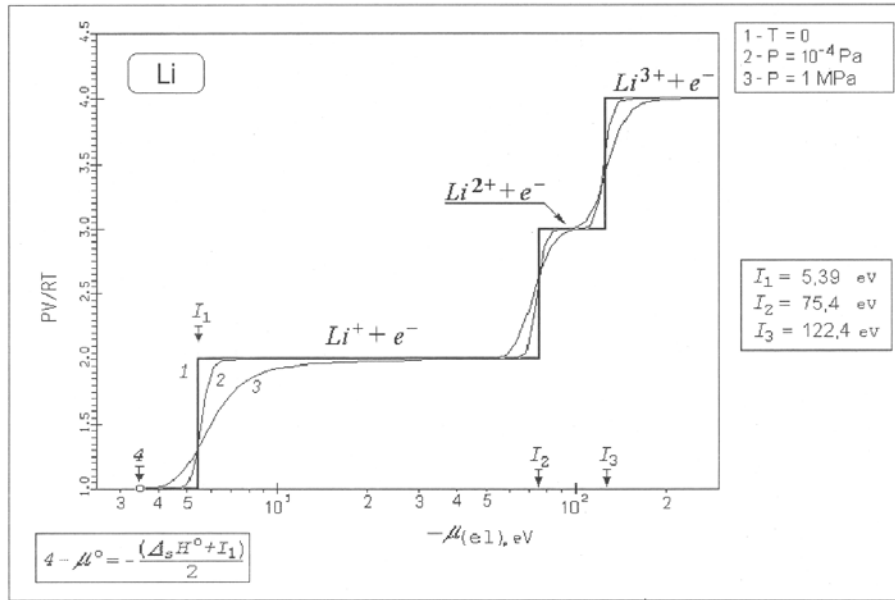


Рис. 4.13: Предельная структура термического уравнения состояния ("лестница ионизации") газовой плазмы лития при $T \rightarrow 0$. Фактор сжимаемости плазмы pV/RT как функции химического потенциала электрона [72]

4.4.2 Термохимические константы в ХМП-пределе

Весь диапазон состояний газовой НТП, начиная от плазмы ядер и электронов, и вплоть до состояния нейтральной смеси атомов и молекул, включая границу этого диапазона - состояние насыщенных паров фазового перехода газ - конденсированное состояние, соответствует в обсуждаемом пределе фиксированному интервалу значений параметра μ_e . Этот интервал (ниже используется термин - "энергетическая шкала" вещества) включает в себя совокупность основных определяющих энергетических характеристик вещества, прежде всего все потенциалы ионизации вещества, $I_1 \div I_z$. Помимо этого энергетическая шкала включает в себя также энергии образования всех молекулярных комплексов (т.н. энергии атомизации). Наконец, верхняя граница этого интервала значений химического потенциала непосредственно связана с энергией сублимации фазового перехода газ-конденсированное состояние $\Delta_s H^\circ$:

$$\mu_e \leq -\frac{[\Delta_s H^\circ + I_1]}{2}. \tag{4.40}$$

Существенно, что в обсуждаемом ХМП-пределе все упомянутые энергетические характеристики точно соответствуют положению и величине определяющих основных (и единственных) структурных элементов в наблюдаемых (предельных) термодинамических зависимостях - уравнениях состояния плазмы и ее дифференциальных термодинамических характеристиках.

4.4.3 Суммарные термодинамические функции

В обсуждаемом пределе (4.39) термодинамика плазмы обладает примечательной ступенчатой структурой [65] основных термодинамических зависимостей (термического

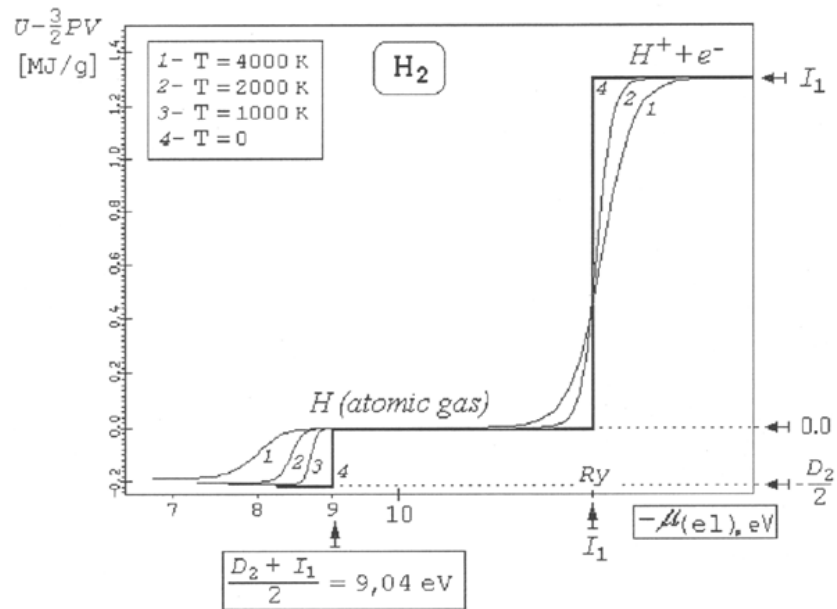


Рис. 4.14: Предельная структура калорического уравнения состояния газовой плазмы водорода при $T \rightarrow 0$. Комплекс $U - 3/2PV$ как функция химического потенциала электрона [72]

и калорического уравнений состояния) когда в качестве управляющего параметра выбран химический потенциал электрона, а в качестве изображаемой величины - так называемое фактор сжимаемости плазмы, pV/RT , для термического УРС, и комплекс (средняя потенциальная энергия) $U - 3/2pV$ для УРС калорического. Соответственно, в обширной низкотемпературной области газовой плазмы термодинамика НТП в большей или меньшей степени воспроизводит эту предельную структуру, "размытую" за счет температурных эффектов, а также за счет эффектов неидеальности, описываемых в терминах ХМП. Обсуждаемая структура уравнений состояния газовой плазмы при $T \rightarrow 0$ вместе с ее характерным сглаживанием при $T > 0$ показана ниже на примере плазмы лития и водорода на рис. 4.13, 4.14. [219].

Принципиальным моментом обсуждаемой структуры ("лестницы ионизации") является то, что все её "ступени" центрированы точно на обсуждавшихся выше главных элементах энергетической шкалы вещества - потенциалах ионизации I_s и энергиях диссоциации D_n , и, наконец, теплоте сублимации $\Delta_s H^0$. Следует подчеркнуть, что единственные наблюдаемые характеристики обсуждаемых здесь предельных структур соответствуют всем возможным связанным комплексам в основном состоянии. В отличие от них возбужденные состояния связанных комплексов не имеют никаких соответствующих им наблюдаемых элементов среди обсуждаемых деталей предельных структур. В этом смысле связанные комплексы, находящиеся в возбужденных состояниях, отнюдь не эквивалентны отдельному дополнительному сорту частиц, как это иногда принято считать на основании формальной эквивалентности основного и возбужденного состояний в канонической процедуре расчета химического и ионизационного равновесия плазмы при $T > 0$.

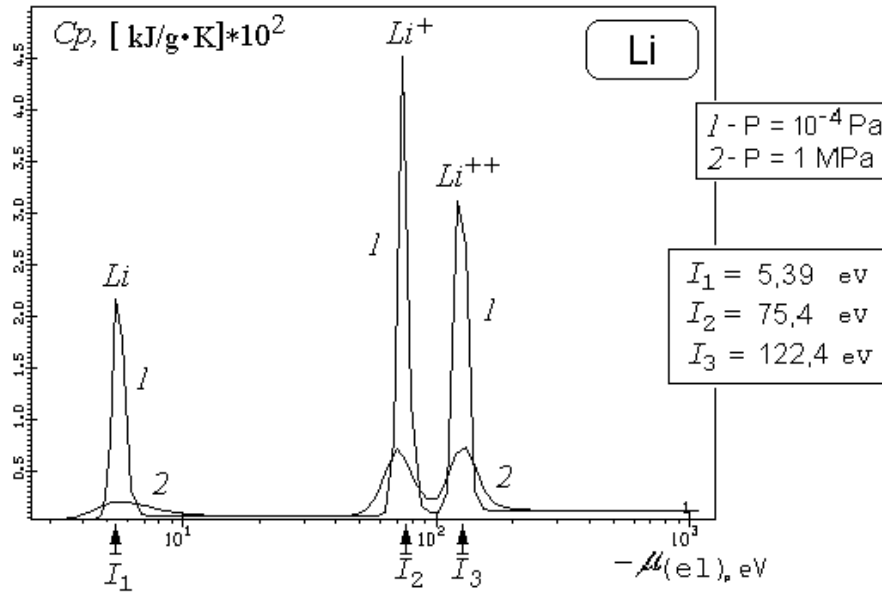


Рис. 4.15: Предельная структура дифференциальных термодинамических характеристик газовой плазмы при $T \rightarrow 0$ ("термодинамический спектр"). Теплоемкость плазмы лития [76]

4.4.4 Дифференциальные термодинамические характеристики

Указанной выше схематической ступенчатой структуре термического и калорического уравнений состояния плазмы соответствует в ХМП-пределе столь же замечательная по своей выразительности предельная структура дифференциальных термодинамических характеристик, когда, как и ранее, в качестве управляющего параметра выбран химический потенциал электрона μ_e (либо атома, молекулы и т.д.). На этот раз главным структурным элементом термодинамических зависимостей $(\partial A / \partial V)_C = f(\mu_e)$ оказываются δ -образные пики (или соответствующие провалы), качественно очень напоминающие обычные спектры излучения или поглощения плазмы. Опираясь на эту аналогию, в [219], [76] предложен и ниже используется термин - "термодинамический спектр" плазмы. Обсуждаемая предельная структура дифференциальных характеристик газовой плазмы при $T \rightarrow 0$ вместе с ее характерным сглаживанием при $T > 0$ иллюстрируется на рис. 4.15 и 4.16, где эта структура представлена на примере поведения изобарической теплоемкости c_p (аналог "спектра излучения"), и эффективного показателя изоэнтропы $\gamma_S = (\partial \ln p / \partial \ln \rho)_S$ (аналог "спектра поглощения") для плазмы лития (расчеты с использованием кода SAHA-IV в пренебрежении вкладом равновесного излучения).

Как и ранее в ситуации с уравнением состояния, существенным моментом обсуждаемого "термодинамического спектра" плазмы является то, что все "линии" центрированы на обсуждавшихся выше главных элементах энергетической шкалы вещества - последовательных потенциалах ионизации, энергиях диссоциации и, наконец, теплоте сублимации. Как и в случае уравнений состояния, в обширной области газовой плазмы термодинамика НТП воспроизводит эту предельную структуру, "размытую" за счет температурных эффектов, а также за счет эффектов неидеальности, описываемых в терминах ХМП.

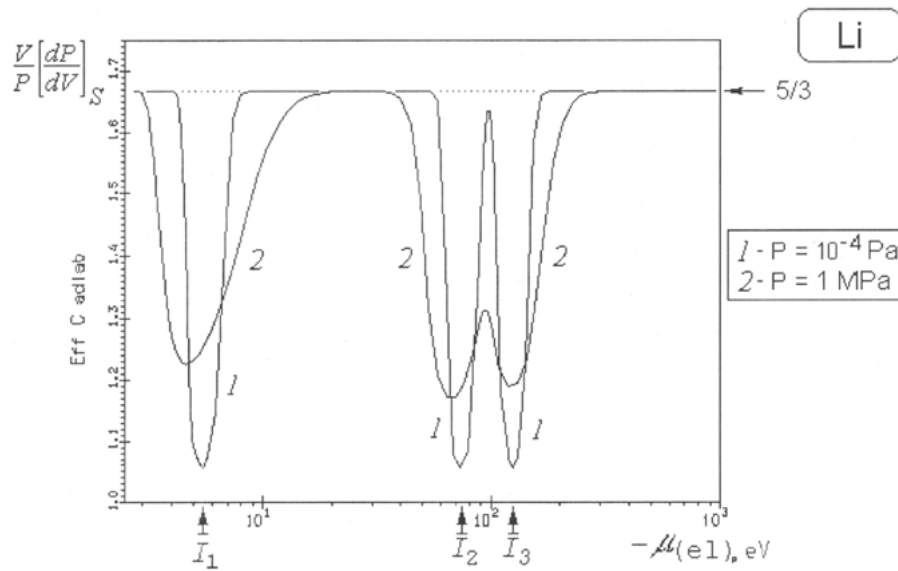


Рис. 4.16: Предельная структура дифференциальных термодинамических характеристик газовой плазмы при $T \rightarrow 0$ ("термодинамический спектр"). Показатель изоэнтропы γ_S плазмы лития [76]

4.4.5 Обобщенная "холодная кривая" вещества

Выбор химического потенциала плазмы в качестве управляющего параметра позволяет провести естественное обобщение так называемой "холодной кривой" вещества (изотермы $T = 0$ для внутренней энергии $U(\rho)$), объединив вместе две её на сей раз содержательные и лишённые неточного толкования ветви: - традиционную ветвь, соответствующую участку сжатия холодного ($T = 0$) конденсированного состояния, преобразованную во внутреннюю энергию, как функцию химического потенциала $U(\mu_a)$, и нетрадиционную ветвь, соответствующую обсуждаемой здесь "лестнице ионизации". Подчеркнем, что во-первых, такая комбинированная единая "холодная кривая" может быть естественно дополнена двумя метастабильными ветвями, соответствующими расширенному кристаллу со стороны конденсированных состояний, и "переохлажденному" (в действительности - пережатому) пару - с противоположной, газовой стороны. А во-вторых, по сравнению с традиционным представлением нулевой изотермы $U(\rho)$ новая единая холодная кривая не содержит некорректной части, соответствующей термодинамически абсолютно неустойчивым состояниям, где нарушается условие: $[\partial p(\rho)/\partial \rho]_T \geq 0$. В качестве примера на рис. 4.17 представлена такая единая (обобщенная) "холодная кривая" (изотерма $T = 0$) для плазмы урана в виде зависимости внутренней энергии $U(\mu_a)$ как функции химического потенциала [76]. Показана газовая часть ("лестница ионизации"), скачок сублимации при $T = 0$ и участок изотермы $T = 0$ для сжатого кристалла (пересчитано по термодинамическим данным И.В.Ломоносова для $U(\rho)$ конденсированного урана при $T = 0$ [107])

4.4.6 Полосы ионизации как "размытый" фазовый переход

Представленная на рис. 4.13 - 4.17 структура газовой части термодинамических зависимостей в ХМП-пределе позволяет проиллюстрировать и сделать более содержательным используемое в литературе сравнение "полос" ионизации и диссоциации с

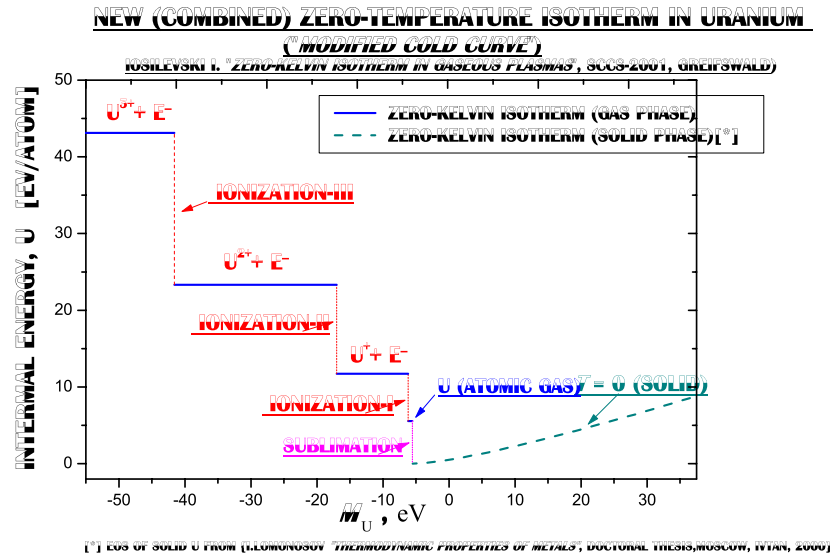


Рис. 4.17: Обобщенная "холодная кривая" плазмы урана. Внутренняя энергия как функции химического потенциала при $T = 0$ [76]

так называемым "размытым фазовым переходом". Из рисунков видно, что оба феномена (полоса ионизации и обычный фазовый переход, скажем, испарение) становятся в пределе $T = 0$ качественно идентичными, будучи изображенными в этом пределе в соответствующих координатах - энергии или давления, как функции химического потенциала. Оба обсуждаемых феномена вырождаются в этом пределе в скачок плотности и внутренней энергии при постоянном давлении (и температуре). В частности, для калорического уравнения состояния это демонстрируется непосредственно на рис. 4.17, а для термического уравнения состояния это схематически показано на рис. 4.18 ([72]).

4.4.7 Нулевое приближение химической модели плазмы

Обсуждаемая структура термодинамических зависимостей газовой плазмы в ХМП-пределе (вся в комплексе) соответствует нулевому приближению во все еще незавершенной процедуре строго обоснования химической модели плазмы, как систематического разложения по малому параметру $[\lambda \sim \exp\{-const/T\}]$ при постоянном значении химического потенциала плазмы. При таком подходе предметом точного количественного обоснования становится отличие термодинамических функций плазмы при конечной температуре ($T > 0$) от их нулевого приближения ("лестницы ионизации") сразу во всем диапазоне значений химического потенциала (энергетической шкалы), охватывающем одновременно все стадии последовательной ионизации и молекулообразования. Наиболее же распространенный сегодня традиционный подход ([18], [91] и др)(см.подробнее часть 3) оперирует с модификацией для случая кулоновской системы разложения по активностям при постоянной (ненулевой) температуре. При этом в силу фактической ограниченности подхода решением лишь парной задачи (фактическая невозможность точно вычислить члены разложения порядка выше

$\zeta^{5/2}$) ограничивает строгие результаты окрестностью зоны протон-электронной рекомбинации с образованием атома водорода, либо зоны старшей ионизации (до ядер и электронов) для других элементов. Следует еще раз подчеркнуть, что предмет строгой количественной теории, как представляется, должны быть все стадии ионизации и молекулообразования одновременно. В этой связи уместно отметить приближение, соответствующее обсуждаемому ХМП-пределу, и не имеющее устоявшегося названия, иногда называемое "приближением САХА". Это приближение идеальной смеси ионов, электронов и атомов в основном состоянии.

Предельно простое в вычислительном отношении, оно оказывается не только полезным методически, но и в ряде случаев удовлетворительно точным для описания термодинамики низкотемпературной газовой плазмы в реальных ситуациях. (Приближение САХА можно расширить, включив него молекулы также в основном состоянии.) Согласно существующим представлениям, хотя это и не является строго доказанным, в ХМП-пределе приближение САХА является асимптотически точным по параметру $\lambda \sim \exp\{-const/T\}$ в пределе $\lambda \rightarrow 0$. Проблема построения систематической теории, включающей в себя (помимо лестницы ионизации, как нулевого элемента) как приближения Саха, так и асимптотически точные (по λ) поправки, отвечающие эффекту возбужденных состояний всех связанных комплексов, а также и специфические поправки, отражающие эффекты плазменной неидеальности, еще не завершена.

В заключение следует подчеркнуть, что основная ценность обсуждаемого здесь предельного характера термодинамических зависимостей прежде всего методическая, так как реально при относительно низких температурах (при выполнении условия (4.31)), для достижения многократной ионизации в процессе предельного перехода $\rho \rightarrow 0$ ($T = const$), требуются столь малые плотности НТП, что само существование термодинамического равновесия в такой НТП становится практически невозможным. Термодинамика вещества при таких условиях является скорее формальной, поскольку основной вклад в термодинамические функции в этих условиях дает равновесное излучение (см. [Я.Зельдович и Ю.Райзер, 1966]).

$$p \equiv p_{газа} + p_{изл} = \sum n_i kT + \left(\frac{4\sigma}{3c}\right) T^4 \cong p_{изл}, \quad (4.41)$$

$$p_{газа} \ll p_{изл} \quad \text{при } T \gg n^{1/3} const, \quad (4.42)$$

(область правее линии 11 на рис. 4.6)

Вместе с тем обсуждаемая предельная структура термодинамических зависимостей является прообразом реальной термодинамики газовой НТП в важном в прикладном отношении диапазоне термодинамических параметров.

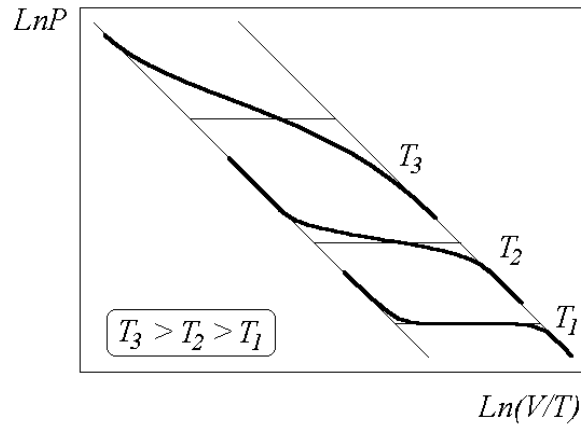


Рис. 4.18: Ионизация как "размытый" фазовый переход (схема) [64]

4.5 Термодинамика плотной плазмы

Согласно существующим представлениям термодинамические свойства плотной плазмы (на "конденсированном" склоне "долины неидеальности" (см.рис. 4.4, 4.5)) радикально отличаются от поведения термодинамических зависимостей в области разреженной, "газовой" плазмы. Центральным обстоятельством здесь является то, что роль температуры, как доминирующего параметра, определяющего содержание термодинамических зависимостей подсистемы свободных электронов, в области плотной плазмы, в силу вырождения электронов, принимает их плотность. При этом характерное для газовой плазмы при её изотермическом сжатии плавное и осциллирующее падение степени ионизации (и диссоциации), сопровождающееся соответствующим падением термодинамических характеристик U и pV , сменяется резким нарастанием всех этих характеристик при продолжении сжатия в область плотной и сверхплотной плазмы (см.рис. 4.4, 4.5).

Данная область состояний НТП соответствует вырожденному электронному компоненту ($n_e \lambda_e^3 \gg 1$) и имеет в $\rho - T$ координатах вид сектора, ограниченного несколькими примечательными линиями. В области ультравысоких плотностей она ограничена условием (соответствующим условию $\rho \gg const$) слабой неидеальности вырожденного ядерного компонента, $(r_s)_{nucl} \sim 1$ (4.32) (линия 9 на рис. 4.6). В области высоких температур выше границы вырождения ядер, $n_Z \lambda_Z^3 \sim 1$ (7 на рис. 4.6) - границей неидеальности невырожденной (классической) системы ядер ($\Gamma_{zz} \sim 1$) (8 на рис. 4.6). Далее условная граница проходит по линии вырождения свободных электронов (см. рис. 4.4 и кривую 6 на рис. 4.6). При еще более низких температурах ($kT \lesssim I_1$) положение границы обсуждаемой области существенно зависит от индивидуальности вещества. Для металлов естественной границей обсуждаемой области параметров НТП является граница испарения конденсированного металла. Для неметаллов смысл такой границы становится неоднозначен. В качестве условной границы обсуждаемой области для неметаллов можно использовать границу заметной ионизации давлением сильно сжатого вещества. (линии 12-13 на рис. 4.6)

В пределах указанной довольно обширной области полезно выделить зоны, обладающие качественно различным характером термодинамического поведения. Прежде всего это область квазиоднородности вырожденного электронного газа. Она соответствует плотностям, выше границы начала заметной локализации вырожденных электронов на ядрах. В качестве такой границы принято использовать границу сильного кулоновского взаимодействия электронов с ядрами [84].

$$\Gamma_{Ze} \equiv \frac{Ze^2 n_Z^{1/3}}{\langle \varepsilon_{kin(e)} \rangle} \sim Z^{2/3} n_e^{-1/3} \sim 1, \quad r_s^{(e)} \sim Z^{-2/3}, \quad n_Z Z \sim const. \quad (4.43)$$

Соотношение (4.43) дает асимптотический порядок этой границы. Более точное её положение дают численные расчеты аналога степени ионизации в ячейке Вигнера-Зейтца (см.рис. 4.4 и рис. 4.5), позволяющие найти границу квазиоднородности вырожденного электронного газа (линия 4** на рис. 4.6).

В обсуждаемой области, ограниченной линиями 9 и 4** на рис. 4.6, подсистема электронов с плотностью ($n_e = Z n_Z \sim \rho$) вырождена, квазиоднородна и почти идеальна [$(r_s)_e \ll 1$], в то время как подсистема ядер сильно коррелирована (неидеальна). Вся плазма близка по своим свойствам к ситуации, описываемой моделью

неидеальной однокомпонентной плазмы - ОКП на однородном компенсирующем фоне электронов [207]. Линия вырождения ядер ($n_Z \lambda_Z^3 \sim 1$) делит обсуждаемую область на вырожденную (квантовую) и невырожденную (классическую) неидеальную однокомпонентную плазму ядер. В глубине этой области в пределах сектора, ограниченного линиями $\Gamma_{ZZ} \cong 180$ и $(r_S)_{nucl} \approx 100$ (линии 5* и 5** на рис. 4.6) расположена область существования кулоновского (вигнеровского) кристалла ядер.

Следует подчеркнуть, что суммарные термодинамические свойства плазмы в этой области близки к идеальным газам из-за доминирующего вклада в термодинамику НТП от вырожденных электронов. В то же время парциальные эффекты, связанные исключительно со спецификой ядерных корреляций - возможная как классическая, так и квантовая кристаллизация ядер, так называемое усиление пикноядерных реакций, возможное расслоение смеси ядер разного заряда на фазы с различающимися пропорциями ядер - являются проблематичными. Данный круг проблем термодинамики такой плазмы традиционно находится в центре внимания астрофизических приложений (см. [207], [156], [212]). Следует оговориться, что область однородности для подсистемы электронов, в состоянии ультравысоких плотностей, делится на подобласти соответствующей границей проявления релятивистских эффектов [156]:

$$x \equiv \frac{p_F}{m_e c} \gg 1, \quad (4.44)$$

$x \cong 1.009(\rho_6/M)$ (ρ_6 - плотность в 10^6 г/см³, $M \equiv A/Z$ - молекулярный вес (число нуклонов на один электрон)). Ограничиваясь лишь термодинамикой электронов по обе стороны границы (4.44), следует указать, что уравнение состояния вырожденных электронов, ведущее себя как $p \sim n^{5/3}$ ниже границы (4.44), становится "мягче", $p \sim n^{4/3}$, при плотностях выше (4.44). Далее, при ещё более высоких плотностях, $\rho \sim 10^7 - 10^8$ г/см³, резко возрастает интенсивность пикноядерных реакций синтеза, в результате чего чисто термодинамическое рассмотрение такой среды, как плазмы постоянного состава, теряет смысл.

Основная неопределенность суммарных термодинамических свойств НТП в области плотной плазмы соответствует плотностям ниже границы квазиоднородности электронного компонента, когда при сохраняющемся вырождении электронов постепенно меняется степень их локализации вблизи ядер, растущая с уменьшением плотности. При описании плазмы высокой плотности, как и в пределе плазмы разреженной, также широко используется термин "степень ионизации", выраженный, например, через плотность электронов на границе ячейки Вигнера-Зейтца, хотя в обсуждаемой области состояний его использование более условно, чем при описании газовой НТП.

Традиционным источником приближенной теоретической информации о термодинамике плазмы в этой области параметров является ячеечное приближение (см. [84], III.1.4 [84]). В прикладных вопросах наряду с применением ячеечного подхода в каком либо из его вариантов (см.1.4) традиционно играют важную роль и широко используются полуэмпирические широкодиапазонные УРС (см. обзоры [15], [69], [140]).

В рамках ячеечного подхода реальная многоядерная сильно коррелированная система заменяется набором одинаковых, статистически независимых, электронейтральных, сферически симметричных, неподвижных, одноядерных ячеек, с окруженным электронами ядром заряда $+Z$, помещенным в центр ячейки. Различные варианты

ячеечного подхода отличаются прежде всего приближением, используемым для описания электронного компонента. Уже простейший вариант, в котором для электронов используется бескорреляционное приближение Томаса-Ферми, воспроизводит основные качественные черты термодинамики плазмы высокой плотности. С точки зрения термодинамических свойств основная проблема в этой области заключается в корректном описании постепенной делокализации электронов в процессе сжатия плазмы. Сопровождается ли эта "ионизация давлением" сколько нибудь заметными "оболочечными осцилляциями", так отчетливо проявляющимися в газовой НТП, или нет? Проблема не имеет окончательного решения, активно обсуждается в литературе и интенсивно исследуется теоретически и экспериментально (см. [84]).

4.5.1 Термодинамика НТП в переходной области

Эта область является средоточием максимальной неопределенности нашего фактического знания термодинамических свойств НТП. Она выходит за пределы традиционных областей применимости основных теоретических подходов, используемых в ТО НТП. Построение ТО НТП является одной из главных целей модернизации этих подходов в процессе их встречной экстраполяции в эту область параметров.

Основным термодинамическим событием в обсуждаемой области является переход от плавного газоподобного и осциллирующего характера термодинамических зависимостей к резко отличному поведению, характерному для слабо сжимаемой (конденсированной) среды.

Известно, что этот термодинамический переход или непосредственно сопровождается, или близко соседствует с электрофизическим переходом - резким ростом проводимости вещества при его изотермическом сжатии свыше некоторого предела ("переход диэлектрик-проводник").

Анализируя термодинамику переходной области, следует разделить ее на область относительно высоких температур, $kT \geq I$ (I - потенциал первой ионизации) и область низкотемпературную ($kT \ll I$). В первой, высокотемпературной части, плазма плавно меняет тип термодинамического поведения, не теряя окончательно проводящих свойств. Вторая низкотемпературная часть характеризуется громадным разнообразием явлений, для описания которых в большинстве случаев более адекватен язык эффективного взаимодействия нейтральных частиц.

Согласно многочисленным приближенным расчетам в диапазоне температур выше потенциала ионизации вещества обсуждаемая переходная область, в хорошем приближении, расположена вблизи линии вырождения электронов ($n_e \lambda_e^3 \sim 1$). Глав-

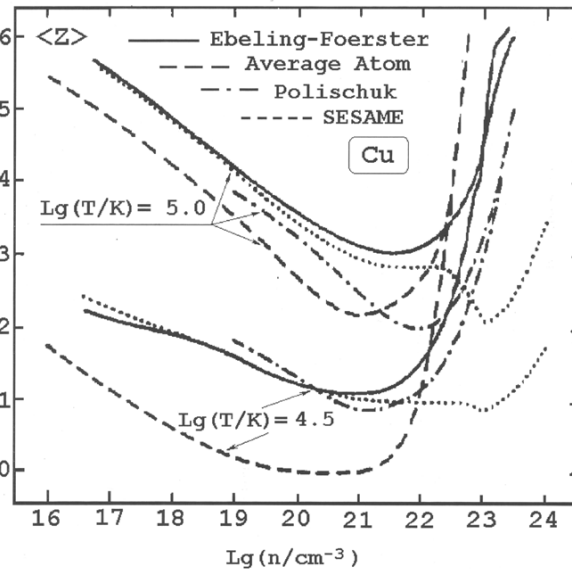


Рис. 4.19: Средний заряд иона, $\langle Z \rangle$, плотной плазмы меди на изотермах по результатам расчета в различных приближениях [192])

ной качественной деталью термодинамических зависимостей в этой переходной области является наличие минимума на кривых, описывающих при $T = const$ поведение степени ионизации системы, а также тесно связанных с нею термодинамических величин, таких как внутренняя энергия, фактор сжимаемости и ряд других в зависимости от плотности (рис 4.4, 4.5 и 4.15). Положение соответствующего минимума, его величина, как и форма кривых в переходной области, являются в настоящее время неопределенными и существенно зависят от выбора теоретической модели, используемой для приближенного расчета. Это показано на рис. 4.19.

Следует подчеркнуть одну особенность. В литературе существует множество примеров приближенных расчетов, демонстрирующих обсуждаемый минимум на языке условной, ненаблюдаемой величины - степени ионизации. Условность этой характеристики в области неидеальной плазмы заметно обесценивает такое сравнение между собой результатов различных теоретических подходов (каждое - со своим, вообще говоря, возможным определением термина "степень ионизации"). Предпочтительным (и единственно корректным) является сравнение на языке наблюдаемых термодинамических величин. В этом качестве можно использовать минимум внутренней энергии $U(\rho)_{T=const}$. Для термического УРС эту роль лишенной условности величины может выполнять минимум комплекса pV или же обобщенного фактора сжимаемости (4.9) как функции плотности при изотермическом сжатии.

Для низкотемпературной части переходной области существенным является то обстоятельство, что два процесса - начало делокализации связанных электронов за счет сжатия (ионизация давлением) и начало соответствующего роста характеристик термического и калорического УРС (рис. 4.4, 4.6), могут выступать как отдельные. Их взаиморасположение на фазовой диаграмме может существенно различаться в зависимости от конкретных свойств вещества. Для многих веществ значительную часть обсуждаемой переходной области занимает термодинамический разрыв в виде фазового перехода газ-жидкость. Для большинства металлов, например, этот переход естественным образом разделяет при $T \ll T_{cr}$ проводящее конденсированное состояние (жидкий металл) от газоподобного состояния слабо проводящих паров.

Смена электрофизического и термодинамического поведения подчиняется в обсуждаемой низкотемпературной части переходной области НТП разным закономерностям [69], [104]. Проблема их взаимозависимости и взаиморасположения является достаточно сложной. Примером НТП, где ионизация давлением при сжатии заметно отделена от начала резкого падения сжимаемости НТП, являются благородные и молекулярные газы [108], [164]. Здесь резкий рост электропроводности холодных газов происходит при плотностях, значительно превышающих плотность, при которой происходит резкое падение их сжимаемости из-за включения механизмов интенсивного межчастичного отталкивания преимущественно нейтральных частиц.

Иная ситуация реализуется в относительно холодных парах металлов ($kT \leq I$). Примером является их поведение в широкой окрестности критической точки перехода газ-жидкость $T \geq T_{кр}$. По существующим представлениям смена термодинамического поведения при этих температурах происходит при пересечении плотностью района критической изохоры ($\rho \geq \rho_{кр}$). Рост же электропроводности и традиционно связываемое с этим представление о резком росте степени ионизации начинаются для большинства металлов при заметно меньших плотностях. Для объяснения этого эффекта привлекаются различные теоретические соображения. Прежде всего это представление о резком (плотностном) снижении эффективного потенциала ионизации

вследствие кулоновской неидеальности, $\Gamma \geq 1$, или же из-за сильного поляризационного взаимодействия заряд-"нейтрал", $\gamma_{za} \sim 1$ [155]. Широко распространены также аргументы, тесно связанные с теорией перколяции, делающие акцент на плотностном эффекте заметного перекрытия областей, занятых валентными электронами металла. Центральной величиной в соображениях такого рода оказывается эффективный размер атома $R_a(I)$, выраженный через его потенциал ионизации I . Это приводит к универсальному критерию перехода диэлектрик-проводник [192], [104]:

$$\left(\frac{4\pi n_a}{3}\right) R_a(I)^3 \sim const \approx 1, \quad R_a(I) \sim \frac{1}{I^\alpha}, \quad (\alpha \approx 0.5 \div 1, 0). \quad (4.45)$$

Механизмы перехода диэлектрик-проводник не исчерпываются вышеназванными. С точки зрения термодинамики важно подчеркнуть, что в зависимости от предлагаемого теоретического механизма обсуждаемой ионизации давлением, одно и то же резкое изменение степени ионизации НТП в процессе перехода диэлектрик-проводник может сопровождаться существенно разными последствиями в термодинамических функциях НТП, в особенности в ее калорическом уравнении состояния, особо чувствительном к конкретному механизму перевода связанных электронов в проводящее состояние.

4.5.2 Термодинамические аномалии НТП в переходной области

Помимо фазового перехода газ-жидкость существует ряд других аномалий термодинамического поведения, предположительно расположенных в обсуждаемой переходной области, и носящих или гипотетический, или окончательно не установленный характер. Одной из них является гипотетический плазменный фазовый переход (ПФП) (см. ниже).

Проблема ПФП одна из наиболее популярных в физике неидеальной плазмы. Возможное наличие ПФП предполагается во многих веществах. Более того, для ряда веществ, например для плазмы гелия, высказывается гипотеза о существовании более одного ПФП [192]. Существенно, что подобно тому как обычный ФП газ-жидкость естественным образом разделяет в обсуждаемой переходной области НТП газо- и жидкоподобное термодинамическое поведение вещества, гипотетический ПФП подобным же образом разделяет слабо- и сильно ионизованные состояния НТП [29], [122].

Можно считать, что к настоящему времени проблема фазовых переходов в плазме условно разделена на два направления:

1. Исследование специфических "плазменных" аспектов обычных ФП газ-жидкость, как в околокритическом поведении реальных ФП в металлах [104], так и в ряде идеализированных плазменных моделей [66], [236].
2. Исследование термодинамически необычных (как правило) свойств гипотетических ПФП.

С гипотезой ПФП в обсуждаемой переходной области НТП тесно связано предположение о возможности и других аномалий термодинамического поведения. Так для НТП водорода в той же области, что и вышеупомянутый ПФП (и с ним тесно связанные), предсказываются возможности существования участков с однофазным УРС,

но с аномальной зависимостью давления от температуры при постоянной плотности. Точнее, предсказывается существование состояний НТП с отрицательной производной $(\partial p/\partial T)_V < 0$. В частности, согласно результатам численного моделирования термодинамических свойств НТП водорода в одном из квантовых вариантов метода Монте-Карло (метод "интегралов по траекториям" (см. VII [160]) такое поведение можно ожидать в диапазоне температур $\sim 5000 \div 10000 \text{ K}$ и давлений $50 \div 100 \text{ ГПа}$.

С точки зрения термодинамических свойств НТП важно то, что проявление свойства (4.46) равносильно предсказанию возможности существования участков с многозначной зависимостью ("складкой") в термическом и калорическом УРС $T(p, V)$ и $U(p, V)$. Вопрос о форме и истинных границах зоны подобного гипотетического поведения УРС НТП является открытым (см. ниже).

Помимо чисто термодинамических аномалий в переходной области НТП возможны аномалии газодинамического поведения НТП, однозначно связанные с особенностями термодинамики НТП, но не приводящие к потере термодинамической устойчивости (см. например [69], [84]). В частности, с возможностью специфического влияния плазменной неидеальности на форму ударных адиабат в плазме металлов связывается предположение о возможности нарушения критериев газодинамической устойчивости ударного фронта. Одна из них связана с потерей положительности производной $(\partial^2 p/\partial \rho^2)_S$. Известно, что это имеет своим следствием смену нормального сочетания необратимого ударного сжатия с обратимым изоэнтропическим расширением на аномальное сочетание необратимого ударного расширения с обратимым изоэнтропическим сжатием (см. разд. VI [160]). Вопрос о форме и границах зоны подобных возможных газодинамических аномалий является объектом интенсивного исследования (см. например [69], [15]).

4.6 Термодинамическое описание и сплошная среда

Термодинамическое описание (ТО) плазмы имеет ряд особенностей с точки зрения своего функционального использования. Помимо собственных термодинамических целей, как источника комплекса суммарных термодинамических величин, ТО НТП играет роль источника входной информации для расчета оптических и переносных свойств. В число потребителей ТО также традиционно входят задачи гидродинамики, в теоретическом описании которых используется приближение локального термодинамического равновесия (ЛТР) (см. разд. I). Как частный случай этого можно рассматривать круг задач "термоэлектростатики" равновесной системы зарядов с локальным УРС. Общей особенностью в обоих случаях является то, что требования к ТО ограничиваются интересом к локальному ("механическому") УРС $U(p, V)$ либо для всей плазмы в целом, либо для ее отдельных компонентов.

4.6.1 Термодинамическое описание в задачах термоэлектростатики

Этим термином обозначен круг задач о вычислении стационарного равновесного профиля НТП в окрестности источника неоднородности. Нередко для первого шага в решения такого рода задач используется приближение квазиоднородности и требуется не локальное УРС всей электронейтральной НТП в целом, а УРС ее отдельных компонентов, обычно заряженных. Примером таких задач являются задача о равно-

весном профиле электронов и ионов вблизи заряженной КДФ-частицы ("пылинки" или капли), аналогичная задаче о профиле ко- и контр-ионов вокруг макроиона в электролитах и коллоидных растворах, а также задача о приграничном распределении свободных зарядов газовой НТП вблизи границы конденсированного вещества, или о равновесном профиле пространственного заряда на межфазной границе в случае "обычных" или гипотетических плазменных фазовых переходов. Сюда можно отнести также и решение традиционной задачи о профиле электронов в "атомной ячейке" в приближении Томаса-Ферми или Томаса-Ферми-Дирака [84] и ряд других задач.

Известно, что все эти проблемы могут быть сформулированы как задачи на условный экстремум свободной энергии системы, $F\{T, V, n(\mathbf{r})\}$, рассматриваемой как функционал одночастичной плотности $n(\mathbf{r})$ (или плотностей, $n_i(\mathbf{r})$). Так для случая одного сорта зарядов Z (например, электронов) функционал свободной энергии может быть представлен в виде [84]:

$$F[n(\cdot)] = Ze \int \varphi_{ext}(\mathbf{x}) \cdot n(\mathbf{x})d\mathbf{x} + \frac{Z^2 e^2}{2} \int \frac{n(\mathbf{x}) \cdot n(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x}d\mathbf{y} + F^*[n(\cdot)], \quad (4.46)$$

$$\int n(\mathbf{x})d\mathbf{x} = const = N. \quad (4.47)$$

Локальное уравнение состояния появляется в этой задаче при использовании приближения квазиоднородности в обменно-корреляционно-кинетическом члене F^* в правой части (4.47), когда в качестве $F(N, V, T)$ используется свободная энергия макроскопической системы зарядов:

$$F^*[n(\cdot)] = \int f[n(\mathbf{x})] \cdot n(\mathbf{x})d\mathbf{x}, \quad f(n) = \lim_{(N \rightarrow \infty, N/V=n)} \left\{ \frac{F(N, V, T)}{N} \right\}. \quad (4.48)$$

Если $F(N, V, T)$ - свободная энергия идеального газа, мы имеем дело с бескорреляционным приближением Пуассона-Больцмана или Томаса-Ферми (для случая вырожденных электронов). Использование в рамках приближения (4.48) простейших обменно-корреляционных поправок приводит к приближению Пуассона-Больцмана-Дебая или Томаса-Ферми-Дирака и т.д. Подчеркнем, что в случае использования в (4.48) плотности свободной энергии неидеальной системы зарядов, все аномалии термодинамического описания макроскопической системы (фазовый переход, многослойность термодинамической поверхности и др.) проявляются на микроуровне в виде соответствующих аномалий равновесного профиля пространственного заряда (разрывов и др.) [66]. В частности, существование таких разрывов при $T = 0$ известно в приближении Томаса-Ферми-Дирака (см. [26]). Выход за рамки приближения ЛТР (4.48) и учет нелокальных эффектов (см. раздел 6 [216]) сглаживает эти аномалии, маскируя обсуждаемую взаимосвязь аномалий термодинамического описания на микро- и макроуровнях.

4.6.2 Термодинамическое описание и задачи гидродинамики

Во взаимоотношении термодинамического описания и гидродинамики можно выделить две различные ситуации. В первом случае результаты термодинамического описания используются как входная информация при расчете задач гидродинамики

НТП. Во втором, напротив, результаты измерения некоторых термо- и гидродинамических (кинематических) характеристик какого-то гидродинамического процесса используются для дальнейшей селекции теоретических моделей, использованных для термодинамического описания НТП, в особенности при экспериментальном исследовании гидродинамики неидеальной плазмы.

Важным классом гидродинамических течений, отличающихся специфическими требованиями к термодинамическому описанию, является класс адиабатических течений, для которых можно пренебречь диссипацией и теплообменом. Это прежде всего изоэнтропическое (обратимое) сжатие и разрежение (адиабата Пуассона - $S = const$). Это также одно- и многократное ударное (необратимое) сжатие (или ударное разрежение в случае НТП с аномальным УРС [69]). Термодинамика такого сжатия описывается адиабатой Гюгонио (4.51). Кроме того, это (изоэнтальпический) процесс Джоуля-Томпсона и (изоэнергетический, $U = const$) процесс расширения газа в пустоту.

Известно, что с точки зрения характера используемой термодинамической информации общим для описания собственно гидродинамики всех этих процессов является то, что для этого требуется только "механическая" часть термодинамического описания - так называемое усеченное калорическое уравнение состояния $U(p, V)$. Соответственно, знание калорического УРС $U(p, V)$ в этом случае более важно, чем знание термического УРС. Ряд термодинамических характеристик полностью определяются усеченным калорическим УРС $U(p, V)$.

1. Дифференциальные характеристики: показатель изоэнтропы - γ_s , связанная с ним скорость звука a_s , а также параметр Грюнайзена - Gr :

$$\gamma_s \equiv -(\partial \ln p / \partial \ln V)_S = [pV + V(\partial U / \partial V)_p] / p(\partial U / \partial p)_V, \quad (4.49)$$

$$a_s^2 = (p/\rho) \gamma_s, \quad Gr \equiv V(\partial p / \partial U)_V. \quad (4.50)$$

2. Локальная и интегральная формы ударной адиабаты (Гюгонио), связывающей параметры по обе стороны ударного разрыва ($\{p_o, V_o, U_o\}$ и $\{p_1, V_1, U_1\}$ соответственно):

$$U_1(p_1, V_1) - U_0(p_0, V_0) = \frac{1}{2}(p_1 + p_0)(V_0 - V_1). \quad (4.51)$$

На рис. 4.20 приведены расчетные зависимости, соответствующие усеченному калорическому уравнению состояния неидеальной плазмы цезия, в диапазоне параметров, соответствующем активно проводившимся в 1970-х годах экспериментам на подогреваемой цезиевой ударной трубе (см.подробнее [16], [32], [69] и часть 1 настоящей книги).

Ввиду термодинамической сопряженности переменных p и V , термодинамическое описание, содержащееся в $U(p, V)$, является неполным. Это означает, что в принципе возможно существование веществ с существенно различающимися термическими УРС, но при этом с близким, или даже полностью тождественными калорическими УРС $U(p, V)$. (Этот момент важен в ситуациях, когда информация о термодинамических характеристиках, получаемых из эксперимента, используется для отбора термодинамических моделей (см. ниже). Показательным примером такой неоднозначности термического УРС при одном и том же калорическом УРС - $U(p, V)$ является сопоставление трех вариантов идеального газа с различным типом статистики

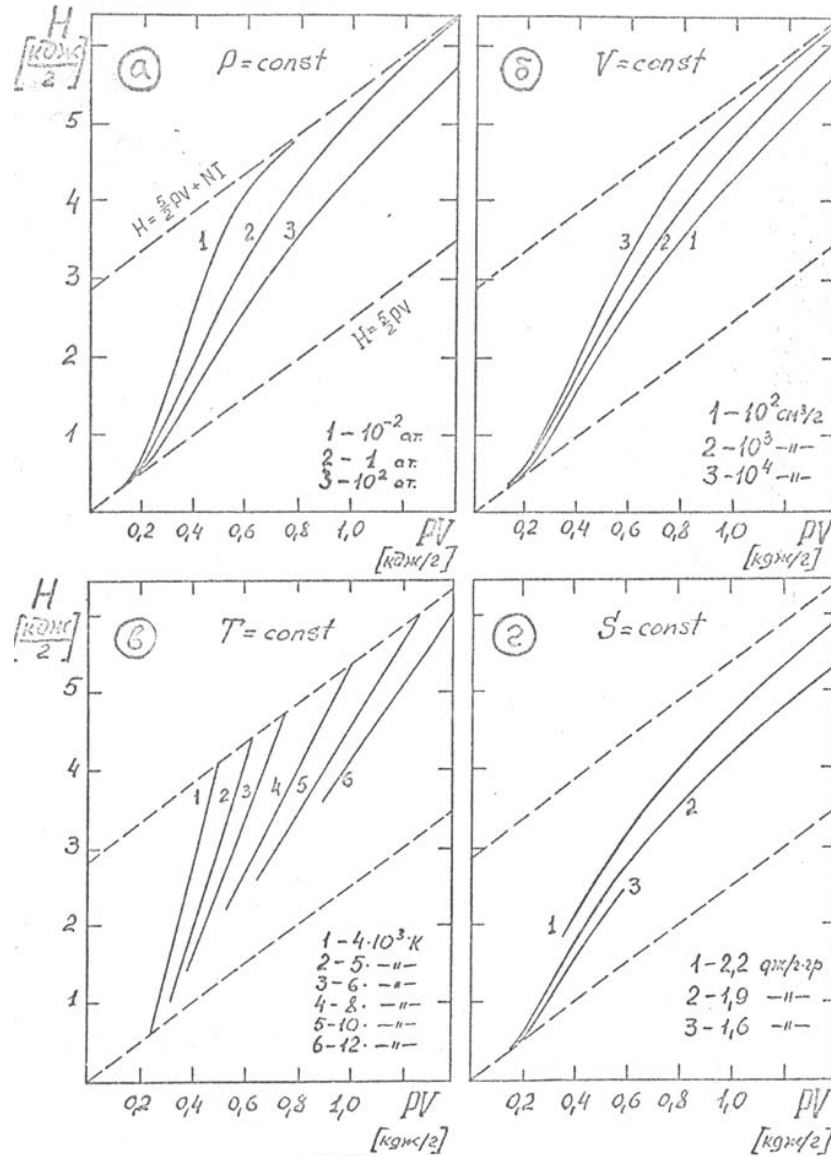


Рис. 4.20: Калорическое уравнение состояния неидеальной плазмы цезия вдоль различных изолиний, $x = \text{const}$, ($x = p, V, T, S$) в пределах полосы первой ионизации. По результатам расчета в приближении неидеальной смеси $Cs + Cs^+ + e^-$ (ограничение суммирования в статсумме атома возбужденными состояниями с энергиями связи, $E_i \geq kT$) (код SAHA-IV). Обозначения: (а) - изобары: 1, 2, 3 - (соответственно) $p = 10^{-3}$, 0,1 и 10 МПа. (б) - изоchoры: 1, 2, 3 - (соответственно) $V = 10^2$, 10^3 и 10^4 см³/г. (в) - изотермы: 1, 2 ..., 6 - (соответственно) $T = 4, 5, 6, 8, 10$ и $12 \cdot 10^3$ К, (г) - изоэнтропы: 1, 2, 3 - (соответственно) $S = 2,2, 1,9, 1,6$ Дж/(г К) (рис. из [59])

- Больцмана, Ферми и Бозе. Известно, что во всех трех случаях при существенно различающихся термических УРС все три системы подчиняются одному и тому же калорическому УРС:

$$U(p, V) = \frac{3}{2}pV.$$

Это означает, в частности, что формы ударных адиабат, адиабат Пуассона, а также зависимость скорости звука и параметра Грюнайзена от давления и плотности (4.49)-(4.51) во всех трех случаях тождественны. И в гипотетической попытке, например, экспериментально разрешить вопрос о типе статистики, используя сколь угодно точные измерения кинематических характеристик адиабатических течений, это оказывается в принципе невозможным.

Важным свойством калорического УРС - $U(p, V)$ НТП в обширной области слабонеидеальной "газовой" плазмы является существенно различная чувствительность внутренней энергии к различным типам вариаций параметров p и V . Доминирующей для $U(p, V)$ является зависимость от произведения pV , являющегося приближенным эквивалентом температуры обычного, термического УРС. На фоне этой главной зависимости, дополнительная зависимость от p или V (при постоянном pV) может во многих случаях рассматриваться как малое отклонение:

$$U(p, V) \approx U(pV). \quad (4.52)$$

Более того, в ряде случаев в ограниченном диапазоне параметров полезным оказывается дальнейшее упрощение этой приближенной зависимости в виде

$$U(p, V) \approx A \cdot (pV) + B \quad (A, B = const). \quad (4.53)$$

Для НТП, подчиняющейся приближенному УРС (4.53), форма адиабаты Пуассона заметно упрощена. Это делает полезным использование т.н. "эффективных" параметра Грюнайзена и показателя изоэнтропы $Gr_{эфф}$ и $\gamma_{эфф}$:

$$\gamma_s \approx \frac{(1+A)}{A}, \quad \gamma_{эфф} \equiv \left(\frac{pV}{U}\right) + 1, \quad Gr_{эфф} \equiv \frac{pV}{U}. \quad (4.54)$$

В теоретическом описании термодинамических свойств НТП, в особенности неидеальной НТП, распространенным является обратный информационный поток, когда результаты экспериментального исследования параметров или особенностей того или иного гидродинамического течения используются в дальнейшем для проверки или отбора среди термодинамических моделей, предлагаемых для описания термодинамики неидеальной НТП (см. например [32], [69], [140]). Достаточно большой удельный вес в этом взаимоотношении имеет использование измерений с участием адиабатических течений. Это прежде всего - следующие измерения.

1. Измерение кинематических параметров: волновой и массовой (D и u) скоростей ударной волны. В сочетании с точно измеренными параметрами невозмущенного состояния вещества перед ударным фронтом это дает, при использовании законов сохранения массы, импульса и энергии на ударном скачке непосредственную информацию о параметрах адиабаты Гюгионо, как в процессе одинарного, так и многократного сжатия (см. часть I).

2. Измерение параметров интенсивного изоэнтропического сжатия $p = p(\rho)|_{S=const}$. В силу специфики такого рода экспериментов, в ряде случаев в них поддается измерению только форма части изоэнтропы, в то время как значение энтропии не фиксируется.
3. Комбинация интенсивного ударного сжатия с последующим изоэнтропическим расширением ("разгрузкой") продуктов сжатия [6]. В таких экспериментах часто фиксируются кинематические параметры обоих процессов, что в конечном счете дает информацию об УРС вещества $U(p, V)$ в труднодоступных областях фазовой диаграммы.
4. Изобарический и изохорический нагрев вещества (изобарический электровзрыв проволочек, или же нагрев вещества в потоке высокоэнергетических частиц, когда удается обеспечить квазиизохорический или квазиизобарический характер нагрева. Это также нагрев содержащих делящееся вещество образцов в контролируемом нейтронном потоке (т. наз "ампульный" эксперимент [129], [177])) и др.
5. Отдельное измерение скорости звука и параметра Грюнайзена во всех вышеперечисленных процессах.

Специфической особенностью одной из вышеперечисленных способов генерации неидеальной плазмы - изоэнтропического расширения ("разгрузки") вещества, предварительного сжатого мощной ударной волной - является то, что непосредственным результатом эксперимента является зависимость (массовой) скорости расширения вещества в зависимости от давления $u = u(p)$. В этом случае получение первичной термодинамической информации - калорического УРС - $U(p, V)$ осуществляется путем использования точных соотношений газодинамики изоэнтропического расширения - так называемых интегралов Римана [54], связывающих между собой изменение удельного объема и внутренней энергии вещества при расширении с зависимостью $u(p)$

$$V(p)|_{S=const} = V_n + \int_p^{p_n} \left(\frac{du}{dp} \right)^2 dp, \quad U(p)|_{S=const} = U_n - \int_p^{p_n} p \left(\frac{du}{dp} \right)^2 dp,$$

(индекс "н" относится к состоянию конца ударного сжатия и начала разгрузки)
 Для обсуждаемого способа генерации и диагностики плазмы существенной является проблема точности измерения $u(p)$ поскольку при значительном перепаде начального и конечного давлений интегрирование зависимости $u(p)$ вдоль изоэнтропы чувствительно к накоплению систематической погрешности (см. подробнее [6] и часть I)

В заключение следует еще раз подчеркнуть, что все вышеперечисленные варианты генерации и диагностики параметров НТП объединяются общим свойством - они в конечном счете дают нам информацию только о калорическом уравнении состояния $U\{p, V\}$ на некотором участке p, V -плоскости.

Глава 5

Термодинамические свойства ударно сжатой плазмы

Расчет уравнения состояния и термодинамических функций - исходный пункт всего комплекса расчета теплофизических свойств вещества, подвергнутого воздействию интенсивного ударно-волнового сжатия и разогрева ([1], [17], [8], [54], [128], [149]). Помимо этого, термодинамический расчет - неотъемлемая часть расчета газодинамики ударного сжатия. Специфика этой взаимосвязи заключается в том, что для весьма широкого и приоритетного с прикладной точки зрения класса газодинамических течений - так называемое адиабатических течений (необратимое ударное сжатие, обратимое изэнтропическое сжатие и расширение, дросселирование и др.) комплекс термодинамических сведений, используемых в газодинамических расчетах в качестве входной информации, принципиально ограничен неполным в смысле термодинамического описания так называемое усеченным калорическим уравнением состояния. Это внутренняя энергия (либо энтальпия) как функция сопряженных термодинамических переменных - давления и удельного объема $U(p, V)$ (см.4.6)

В области теоретического описания термодинамики ударно сжатой плазмы можно выделить традиционный полуфеноменологический подход, развивавшийся в применении к экстремально сжатому состоянию вещества, Кормером, Урлиным, Копышевым и др. (см.подробнее [140] и обзоры [1], [17], [8], [54], [128], [149]). Альтернативный подход опирается на микроскопические представления статистической механики системы многих частиц. В рамках этого подхода основным определяющим обстоятельством является дуализм двух сосуществующих альтернативных способов описания, за которыми закрепились термины - "физической" и "химической" моделей вещества (Physical and Chemical Pictures) [29], [192]. Основу строгой "физической модели" составляет описание вещества, как совокупности ядер и электронов с чисто кулоновским межчастичным взаимодействием. При этом все реально существующие в системе свободные и связанные состояния групп частиц описываются, в принципе, единым и согласованным образом как разнообразные проявления и следствия неидеальности, т.е. результат простого по своей структуре взаимодействия одних и тех же элементарных частиц - электронов и ядер. При таком подходе почти вся проблема описания термодинамики вещества превращается как бы в ветвь физики неидеальной плазмы. Строгость и структурная простота физической модели, однако, оборачивается сложностью фактической реализации такого теоретического подхода. Достаточно полную картину современного состояния теории можно найти, например, в трудах

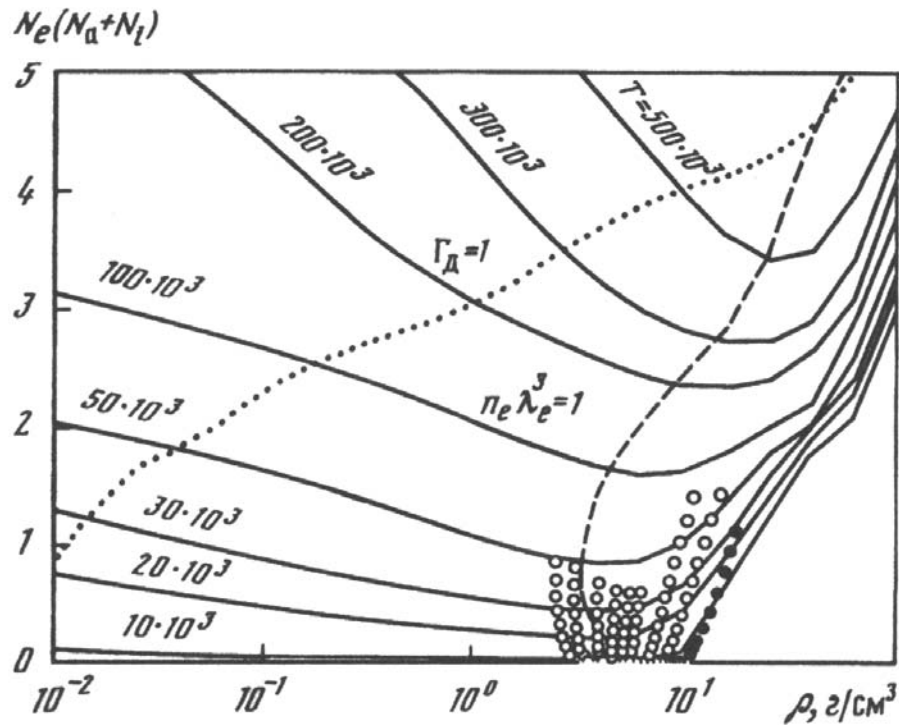


Рис. 5.1: Поведение степени ионизации плазмы никеля при сжатии [201]. Изображены расчетные степени ионизации вдоль изотерм и ударных адиабат сплошного и пористых образцов никеля в сравнении с экспериментальными данными. Отмечены линии постоянных параметра кулоновской неидеальности Γ и параметра вырождения электронов (рис.из [201])

конференций по физике неидеальной плазмы [254], [256], [255].

Реальные возможности сегодняшней теории в рамках физической модели практически ограничены первыми членами теории возмущений [18], [91], [166], [86]. Следует отметить прогресс, достигнутый в последние годы в описании равновесной квантовой многоядерной системы на пути прямого численного моделирования [257] или в рамках так называемое метода функционала плотности [134], [271].

Возможности описания в рамках физической модели термодинамики реальных ударно-сжатых веществ помимо водорода, и быть может гелия, представляется сегодня достаточно далекой перспективой. Подавляющее большинство практических расчетов термодинамики реальных веществ осуществляется в рамках альтернативной "химической модели". В ней условно элементарными составляющими являются многочисленные по своей номенклатуре составные частицы, обладающие внутренней структурой и внутренними степенями свободы частицы - атомы, молекулы, атомные и молекулярные ионы и т.д. вплоть до кластеров и макромолекул. Потерей строгости в химической модели покупается максимальная приближенность всей системы и нулевого для этой модели приближения, в частности, - идеально-газовой, переменной по составу смеси указанных выше комплексов - к узкой конкретной ситуации, будь то холодный (относительно) молекулярный газ или частично ионизованная разреженная плазма. Все приведенные ниже в этой главе результаты относятся как раз к такому подходу, т.е. к химической модели.

Согласно существующим теоретическим представлениям и многочисленным при-

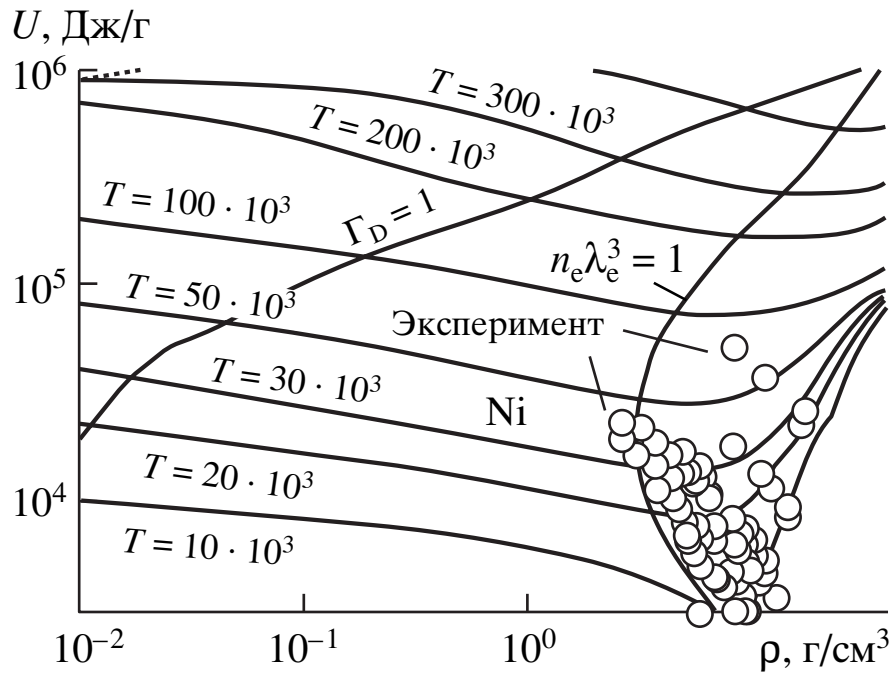


Рис. 5.2: Внутренняя энергия $U(\rho)$ для плазмы никеля (обозначения как на рис. 5.1) [201]

ближенным расчетам, проведенным в рамках химической модели, можно следующим образом охарактеризовать самую общую "глобальную" структуру термодинамических зависимостей, присущих любому веществу при температурах не превышающих характерную энергию связи атома этого вещества ($T \leq Z^{7/3} Ry$). Вся фазовая диаграмма вещества, скажем в координатах плотность - температура, может быть условно разбита (разделена) на три области (см.подробнее 4.2: две идеально-газовые асимптотики: (А) - очень низких плотностей $\rho \rightarrow 0$ (классический идеальный газ ядер и электронов) и (В) - очень высоких плотностей $\rho \rightarrow \infty$ (также идеальный, но вырожденный и квазиоднородный газ тех же ядер и электронов). (С) - Расположенная между ними промежуточная область, неидеальная в терминах физической модели, которая может быть условно названа образным термином "долина неидеальности" [192].

На рис. 5.1 приведена полученная в результате расчета условная, вообще говоря, величина - степень ионизации $\alpha \equiv N_e/N_{nucl}$ для плазмы никеля. На рис. 5.2 приведена, также расчетная, величина - полная внутренняя энергия $U(\rho)$ для плазмы никеля [201], [39].

На обоих рисунках нанесены границы кулоновской неидеальности и вырождения электронов. При очень низких температурах (ниже теплоты испарения) структура фазовых диаграмм для величин (4.9)-(4.10) резко усложняется за счет деталей, связанных с поведением конденсированного вещества. Для интересующей же нас обширнейшей газовой и плазменной областей "долина неидеальности" отчетливо распадается на две части - больших и малых плотностей, которые в образных терминах [192] могут быть названы "газовым и конденсированным склонами" этой "долины неидеальности". Между ними располагается переходная область, характеризующаяся минимальными значениями соответствующих комплексов (4.9) - (4.10)

и одновременно максимальным нарушением условий "слабой неидеальности" - малости средней энергии взаимодействия составляющих химическую модель частиц по сравнению с их средней кинетической энергией. Глубина и местоположение минимумов термического и калорического безразмерных комплексов (4.9) - (4.10) на изотермах может условно рассматриваться как средоточие максимальной неопределенности нашего количественного знания о термодинамических свойствах нагретого вещества. Примыкающие же к ней со стороны малых и больших плотностей области фазовой диаграммы соответствуют традиционным областям применимости двух основных расчетно-теоретических подходов, реально составляющих основу большинства проведенных к настоящему времени расчетов термодинамических свойств плазмы, получаемой при высокоэнергетическом динамическом воздействии на вещество. Со стороны малых плотностей это так называемое химическая модель плазмы (см. ниже), а со стороны высоких плотностей - ячеечная модель конденсированного вещества [84].

5.1 Химическая модель плазмы в области малых плотностей

Основу химической модели (см. например [54], [29], [32], [78], [11]) составляет представление свободной энергии системы в виде суммы нулевого приближения - слагаемого F_{id}^0 , отвечающего переменной по составу идеально-газовой смеси широкого спектра простых и составных частиц - электронов и ионов, атомов и молекул и т.д. - и членов, описывающих взаимодействие между этими частицами. Последние обладают в общем случае внутренними степенями свободы - возбужденными состояниями - находящимися в термодинамическом равновесии со всей системой в целом, то-есть с ее поступательными степенями свободы частиц.

$$F(\{N_i\}, V, T) \equiv F_{id}^0 + \Delta F_{int}(\{N_i\}, V, T) = \sum_j N_j kT \left(\ln \frac{n_j \Lambda_j^3}{Q_j} - 1 \right) + \Delta F_{int}(\{N_i\}, V, T). \quad (5.1)$$

Здесь N_i - число частиц сорта i , V - объем, T - температура системы, k - постоянная Больцмана, Λ_j - тепловая длина волны Де-Бройля, Q_j - статистическая сумма частицы сорта j .

Традиционной областью применимости химической модели является частично ионизованная плазма невысокой "газовой" плотности. При этом считаются выполненными следующие допущения и ограничения, отклонения от которых :

- Вклад эффектов межчастичного взаимодействия свободных частиц в уравнение состояния мал по сравнению с идеально-газовым слагаемым как в выражении для свободной энергии (5.1), так и в получаемых дифференцированием (5.1) соответствующих выражениях для термического и калорического уравнений состояния $p(\{N_i\}, V, T)$ & $U(\{N_i\}, V, T)$, а также для химических потенциалов частиц $\mu_j(\{N_i\}, V, T)$.
- Искажения энергий и статистических весов внутренних возбужденных состояний составных частиц (ионов, атомов, молекул и др.) под влиянием окружающих частиц - незначительны и могут не учитываться.

- Принципиально присущая химической модели неопределенность с ограничением числа возбужденных состояний, учитываемых при расчете статистических сумм $Q_i(T)$, существует, но реально не сказывается на уравнении состояния и суммарных термодинамических функциях. Вопрос о влиянии этих факторов на оптические и переносные свойства считается выходящим за рамки проблемы собственно уравнения состояния вещества.

Важнейшим следствием принятых допущения являются то, что:

- Используются уравнения состояния (термическое и калорическое), а также уравнение, задающее химические потенциалы частиц, соответствующие классической идеально-газовой смеси частиц, возможно дополненные учетом малых поправок на неидеальность и модифицированные для учета вырождения электронов.
- Используются спектральные и термохимические характеристики (экспериментально измеренные или расчетные), соответствующие условиям связанных состояний изолированных частиц (атомов, ионов, молекул и др.).

Границы применимости химической модели характеризуются набором соответствующих безразмерных параметров, контролирующих малость эффектов неидеальность по различным взаимодействиям "свободных" частиц: кулоновское взаимодействие, взаимодействие заряд-нейтрал, Ван дер Ваальсово короткодействующее притяжение частиц, и наконец, эффекты короткодействующего отталкивания частиц, в первую очередь нейтральных атомов. Кроме того эффекты квантовой статистики контролируются малостью параметра вырождения свободных электронов.

Химическая модель плазмы широко используется для расчета термодинамических свойств "газовой плазмы" [54], [32], [78], [11] и, в частности, параметров ударно-волнового сжатия вещества в этой области (например [29], [31]).

Структура системы уравнений, используемых для расчета равновесного состава (химического и ионизационного) и термодинамических функций слабонеидеальной "газовой" плазмы является на сегодняшний день стандартной и многократно описана в литературе (см. например [54], [32]). Решение соответствующей системы уравнений единственно [52]. Основной чертой получаемых в результате расчета термодинамических зависимостей является их плавное и почти монотонное поведение во всей идеально-газовой области фазовой диаграммы, (которую условно можно назвать "газовым склоном долины неидеальности").

Описанная в гл.4 схематическая картина термодинамического поведения характерна для классической идеальной разреженной плазмы. Повышение плотности приводит к размыванию границ полос ионизации и диссоциации уже в идеально-газовой схеме. На этот процесс накладывается дополнительное влияние различных механизмов неидеальности, приводящих, как правило, к дополнительному размыванию этих полос [64], [32]. В качестве "нулевого" приближения при описании частично ионизованной слабо неидеальной газовой плазмы широко используется, например, расчет в приближении классической идеальной смеси с произвольными химическими реакциями и допустимой многократной ионизацией и с ограничением внутриатомных и внутри-ионных статистических сумм на величине энергии связи порядка kT , дополненное учетом поправки на кулоновскую неидеальность в так называемое дебаевском приближении в большом каноническом ансамбле [101], модифицированном на

случай многократной ионизации [29], [32] и дополненная учетом вырождения электронов в соответствующем им идеально-газовом слагаемом свободной энергии (5.1). Преимуществом этого приближения является принципиальное отсутствие при его использовании возможности потери термодинамической устойчивости, что является характерным для любых приближений, компактно выражаемых в виде единой формулы в переменных большого канонического ансамбля [30], [32]. Это же является причиной единственности решения задачи расчета равновесного состава при произвольных значениях термодинамических параметров и кратности ионизации [58].

Как отражение наличия в газовой области обсуждаемой "полосатой" структуры, можно рассатривать вопрос о самом факте существования и размерах подобных оболочечных осцилляций в области экстремально высоких сжатий. Эта проблема активно обсуждается в литературе, а поиск таких осцилляций является одним их объектов интенсивных экспериментальных усилий. На сегодняшний день вопрос о наличии оболочечных осцилляций в области сжатого вещества остается открытым (см. подробнее [140]).

5.2 Химическая модель в области больших сжатий

Источники трудностей, возникающих при экстраполяции теоретических моделей в область неидеальной плазмы (НП) можно условно разделить на три части: (А) - следствия дальнедействующего характера кулоновского потенциала, (В) - квантовые эффекты (эффекты дифракции и квантовой статистики (вырождения) электронов), и (С) - наличие сильного притяжения на близких расстояниях между зарядами противоположного знака.

Особенностью большинства интересующих нас в реальной НП случаев является то, что все три указанные трудности накладываются друг на друга, затрудняя применение методов, развитых в теории для описания каждого из них в отдельности. Особую роль играет последнее из трех указанных выше обстоятельств, так как именно оно при температурах не превышающих энергии полной (до ядер) ионизации атома заставляет нас переходить к от характерного для строгой физической модели описания плазмы как совокупности электронов и ядер, к кажущимся более простыми и интуитивно понятными представлениям химической модели.

Проблемы, возникающие при экстраполяции химической модели плазмы в область высоких плотностей, можно условно разделить на две части:

1. - проблемы собственно неидеальности, т.е. вычисления эффектов межчастичного взаимодействия по известным (заданным) потенциалам этого взаимодействия.
2. - проблемы, связанные со спецификой самого процесса перехода от точных представлений физической модели к "эффективным" представлениям модели химической. Они заключаются в необходимости перенормировки исходного чисто кулоновского взаимодействия электронов и ядер и перехода к набору эффективных потенциалов взаимодействия вновь введенных сортов свободных частиц. Это необходимо прежде всего, чтобы избежать так называемое "двойного счета", когда одни и те же участки фазового пространства исходной системы электронов и ядер могут быть повторно учтены при различных комбинациях

одних и тех же частиц первоначально в разряде свободных, а затем связанных [29], [61], [32].

Главной особенностью такой перенормировки в химической модели является то, что ее результат принципиально неоднозначен и зависит от выбора конкретного способа определения новых сортов составных частиц, т.е. от выбора условий, разделяющих состояния, называемые свободными, от состояний, называемых связанными. В силу условности такого разделения для СНП в посвященной этой проблеме литературе существует правило (принцип), которое можно считать общепринятым (см. [188], [29], [32], [63], [50] и имеющиеся там обсуждения) согласно которому приближение, описывающее плазму, должно быть построено так, чтобы суммарные термодинамические величины не зависели от указанного произвола, связанного с разделением состояний. При этом сам выбор конкретного способа разделения может быть даже вынесен за пределы собственно термодинамики и подчинен требованиям, вытекающим из тех или иных особенностей приближенного аппарата, используемого при расчете переносных свойств плазмы. В частности, он может быть различным, в зависимости от дальнейшего предназначения вычисленного равновесного состава либо для расчета оптических свойств или же для свойств электронно переноса и т.д.

Одним из непосредственных следствий указанной условности деления на свободные и связанные состояния и перехода к эффективным взаимодействиям как вне, так и внутри вновь введенных сортов составных частиц (атомов, молекул, ионов и т.д.), является дополнительная зависимость статистических сумм $Q_i(T, \varepsilon(\{n_j\}, T))$, а с ними и всего идеально-газового слагаемого свободной энергии $F_{id}(T, V, \{N_j\})$, от термодинамических параметров через переменную "границу обрезания" $\varepsilon(n, T)$. Непосредственным результатом этого является появление дополнительных "косвенных" поправок ко всем термодинамическим величинам, содержащих производные $\partial \ln Q_i(\varepsilon(\{n_j\}, T))/\partial \varepsilon$. Эти поправки принципиально отличаются от привычных кулоновских, получаемых при дифференцировании неидеальной части свободной энергии $\Delta F_{Coul}(T, V, \{N_j\})$, и в подавляющем большинстве случаев не учитываются в практических расчетах.

$$\frac{\Delta p}{\sum n_i kT} = \left\{ \sum x_i \left(\frac{\partial \ln Q_i}{\partial \ln \varepsilon} \right) \right\} \left(\frac{\partial \ln \varepsilon}{\partial \ln V} \right), \quad (5.2)$$

$$\frac{\Delta U}{\sum N_i kT} = \left\{ \sum x_i \left(\frac{\partial \ln Q_i}{\partial \ln \varepsilon} \right) \right\} \left(\frac{\partial \ln \varepsilon}{\partial \ln \beta} \right), \quad (5.3)$$

$$\Delta \mu_{\alpha i} kT = \left\{ \sum q x_i \left(\frac{\partial \ln Q_i}{\partial \ln \varepsilon} \right) \right\} \left(\frac{\partial \ln \varepsilon}{\partial x_{\alpha}} \right). \quad (5.4)$$

Здесь x_i - доля компонента i ($x_i \equiv N_i/\sum N_k$)

Сравнительный анализ этих эффектов, проведенный в работе [30], на примере ряда широко используемых способов ограничения атомных статистических сумм показывают, что они существенно индивидуальны и зависят от структуры возбужденных состояний комплексной частицы. В целом они сказываются в области высоких давлений порядка нескольких десятков килобар, когда ионизация "затягивается" в область высоких температур. Это именно та ситуация, что реализуется при интенсивном ударном сжатии вещества мощными ударными волнами. Например, для Ar и Xe

при $p \sim 3 \cdot 10^4$ бар и $T \sim 3 \cdot 10^4$ К входящая в (5.2)-(5.4) производная $\partial \ln Q_i / \partial \ln \varepsilon$, взятая на глубине обрезания равной kT , составляет ~ 0.25 . При таком способе ограничения эта величина и является безразмерной поправкой к внутренней энергии энергии (5.3), в то время как поправки (5.2) и (5.4) равны нулю. Для водорода та же сумма при тех же параметрах равна ~ 0.1 . Для щелочных металлов, в частности для Cs, поправки (5.2)-(5.4) заметны уже при $p \sim 10$ бар и $T \sim 7000$ К и в этой области сравнимы по величине с традиционными кулоновскими поправками. Наиболее важно, что при использовании ограничения возбужденных состояний, зависящем от плотности, что опять-таки характерно для условий плотной плазмы созданной мощной ударной волной в конденсированном веществе, обсуждаемые нетрадиционные поправки появляются в общем случае в выражении для химических потенциалов всех сортов частиц (5.4). Результатом является сдвиг ионизационного и химического равновесия, в наибольшей степени сказывающийся на суммарном термодинамическом эффекте обсуждаемого механизма. Анализ [30] показывает, что главный качественный эффект от включения поправок (5.2)-(5.4) (i) равносильен эффективному дополнительному отталкиванию, (ii) появляется одновременно с пересечением границы неидеальности $\Gamma \sim 1$ и (iii) сравним по величине с эффектом от включения традиционных кулоновских поправок.

Пренебрежение поправками (5.2)-(5.4) приводит к несогласованности термодинамических величин. Этой несогласованности не возникает, когда обсуждаемая граница возбужденных состояний, так же как и равновесный состав, находится из условия минимума свободной энергии. Для того, чтобы такой минимум существовал, обсуждаемая граница $\varepsilon(n, T)$ должна одновременно определять глубину эффективного псевдопотенциала взаимодействия свободных зарядов, и эта зависимость должна явным образом содержаться в члене ΔF_{Coul} , описывающем кулоновскую неидеальность в свободной энергии F . Подчеркнем, что такая взаимосогласованность и подразумевается обычно в качестве критерия корректности присущего химической модели разделения свободных и связанных состояний. Она необходима также для упоминавшейся выше независимости суммарных термодинамических величин от условности этого деления в области сильно неидеальной плазмы. В практических расчетах, особенно играющих роль опережающих оценочных расчетов, широко практикуется использование упрощенного ограничения статистических сумм на каком-то независимом от термодинамических параметров уровне, например на основном состоянии атома, иона и т.д. Также широко распространено использование ограничения статистических сумм возбуждения величиной, зависящей только от температуры. Таковой является, например, широко используемая так называемая сходящаяся форма статистической суммы Планка-Ларкина [252], [100], [86], [92] (см. также обсуждение в [29] и в [92]). В целом, данная проблема далека от разрешения в приложении к рассматриваемым в данной книге условиям плотной сильносжатой плазмы, созданной интенсивной ударной волной.

5.2.1 Эффективное взаимодействие зарядов

Указанная выше проблема экстраполяции химической модели в область СНП - необходимость избежать "двойного счета" - может быть, в принципе, решена естественным образом путем введения для новых сортов частиц недоступных им участков фазового пространства [284]. Альтернативный путь состоит в одном из двух фор-

мально точных вариантах действий: -либо делении s -частичной слетеровской суммы [245], [224], [189], [50], либо в делении и соответствующем переопределении членов разложения термодинамического потенциала плазмы по степеням активности [125], [8]. Такой путь возможен (см. обсуждение в §1.4 [32]), но сопряжен, однако, с большими формальными сложностями. В результате в подавляющем большинстве случаев эту проблему пытаются решить за счет введения набора эффективных парных псевдопотенциалов, как "внешних", действующих между свободными частицами, так и "внутренних", используемых при расчете связанных состояний комплексных (составных) частиц. При этом снимаются ограничения на координаты и импульсы как свободных, так и связанных частиц.

Следует подчеркнуть, что формально точный переход к химической модели с псевдопотенциалами приводит к тому, что в общем случае эти потенциалы а) зависят от термодинамических параметров, б) не являются парными, с) не являются центральными, д) вообще говоря, зависят от импульсов.

В реальности задача всегда огрубляется до псевдопотенциалов парных, центральных, зависящих от координат и возможно от термодинамических параметров (как правило, только от температуры [29], [192], [188], [50], [121]).

Основной качественной особенностью эффективных псевдопотенциалов химической модели, учитывающих явно выделение связанных состояний, является наличие в них дополнительного эффективного отталкивания по сравнению с исходным кулоновским потенциалом. Размеры и интенсивность этого отталкивания существенно зависят от выбора границы, разделяющей свободные и связанные состояния и самого способа разделения. Примером подобной перенормировки для случая короткодействующего классического притяжения и в парном приближении - является работа Хилла [153].

Для плазмы псевдопотенциальная модель с близким к [153] смыслом псевдопотенциала была предложена работах [245], [224], [189] и в серии работ [51], [50], где ПП вычислялся с привлечением водородроподобных атомных волновых функций. Сложные по форме псевдопотенциалы [51] были в дальнейшем заменены упрощенным ПП "нулевого приближения" с фиксированным отношением глубины потенциала к температуре [50]. Принципиально важным следствием такого выбора было сохранение присущего классическим кулоновским системам соотношения между поправками к давлению и внутренней энергии $\Delta U = 3\Delta pV$ для свободных зарядов.

Отличный от [51], [50] вариант псевдопотенциальной модели был предложен для классической невырожденной частично ионизованной плазмы в работах [59], [61], [63]. Принципиальные моменты этой модели таковы:

- Глубина электрон-ионного МПП связана с положением принятой (вообще говоря, произвольной) границы - ε , разделяющей свободные и связанные состояния. Одновременно эта же величина - ε является границей, связанных состояний, учитываемых при вычислении статистических суммы возбуждения атомов и ионов.

$$\Phi_{ie}^*(r) = -\frac{Z_i e^2}{r} (1 - e^{-r/\sigma}), \quad [\sigma \equiv \sigma(n, T)]. \quad (5.5)$$

- Выбор смысла и величины $\varepsilon(n, T)$ не ограничен традиционным разделением по относительной энергии связанной пары, а может быть произвольным, и в частности, соответствовать покоординатному принципу разделения и др.

- Для ион-ионного и электрон-электронного ПП-лов сохранялась кулоновская форма.

$$\Phi_{ee}^*(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad \Phi_{ii}^*(r) = -\frac{Z_i Z_j e^2}{r}$$

- - После выбора МПП межчастичного взаимодействия дальнейшие приближения, необходимые для вычисления поправок на неидеальность, рассматриваются на языке парных корреляционных функций. При этом развивается подход [61], [59], [58], [32], [30], [28] проверенный на кулоновских моделях, когда для указанных парных корреляционных функций сохраняется функциональная зависимость (5.6), соответствующая пределу слабой неидеальности [25].

$$F_{ab}(r) = 1 \pm A \frac{e^{-pr} - e^{qr}}{r} \equiv 1 \pm \Psi_0 e^{-\nu r} \frac{sh\omega r}{\omega r}. \quad (5.6)$$

- В тоже время параметры этой зависимости, выбираются из общих условий, независящих от малости взаимодействия (неидеальности). Доминирующими среди этих соотношений являются так называемое правила "локальной электро-нейтральности" (5.7), (5.8) {правила нулевого и второго моментов Стиллингера и Ловетта [278]}, а также термодинамически согласованная связь амплитуды электрон-ионных корреляций ("экранирующего облака") с глубиной соответствующего псевдопотенциала $\Phi_{ei}^*(r=0)$ (5.5)

$$n \int [F_+(r) - F_-(r)] d\mathbf{r} = 1, \quad (5.7)$$

$$n \int [F_+(r) - F_-(r)] \left(\frac{r^2}{r_D^2} \right) d\mathbf{r} = 3, \quad (5.8)$$

$$-\Psi_0 \approx -\ln F_+ \approx \beta [\Phi_{ei}^*(0) - \Delta\mu_e - \Delta\mu_i]. \quad (5.9)$$

- При вычислении эффектов неидеальности в поправках к термодинамическим величинам явным образом учитываются следующий из теоремы вириала сдвиг средней кинетической энергии свободных зарядов ΔU_{kin} .

$$U = U_{kin} + U_{pot} \quad 3pV = 2U_{kin} + U_{pot},$$

$$\Delta U_{pot} = -Vn \int \Phi_{coul} (F_+ - F_-) d\mathbf{r}, \quad (5.10)$$

$$\Delta U = -Vn^2 \int (F_+ \Phi_{ei}^* - F_- \Phi_{ii}^*) d\mathbf{r}, \quad (5.11)$$

$$\Delta pV = \frac{1}{3} (2\Delta U - \Delta U_{pot}) = \frac{1}{3} (2\Delta U_{kin} + \Delta U_{pot}), \quad (5.12)$$

$$\Delta\mu_i = \Delta\mu_e \approx (N_i + N_e)^{-1} \Delta U. \quad (5.13)$$

Здесь ΔU и ΔU_{pot} - поправки к полной внутренней и отдельно к средней потенциальной энергии плазмы, а μ_i и μ_e химические потенциалы свободных зарядов. При этом соотношение (5.11) является точным, когда псевдопотенциал (5.5) не зависит от термодинамических параметров, а (5.12) является следствием теоремы вириала [16].

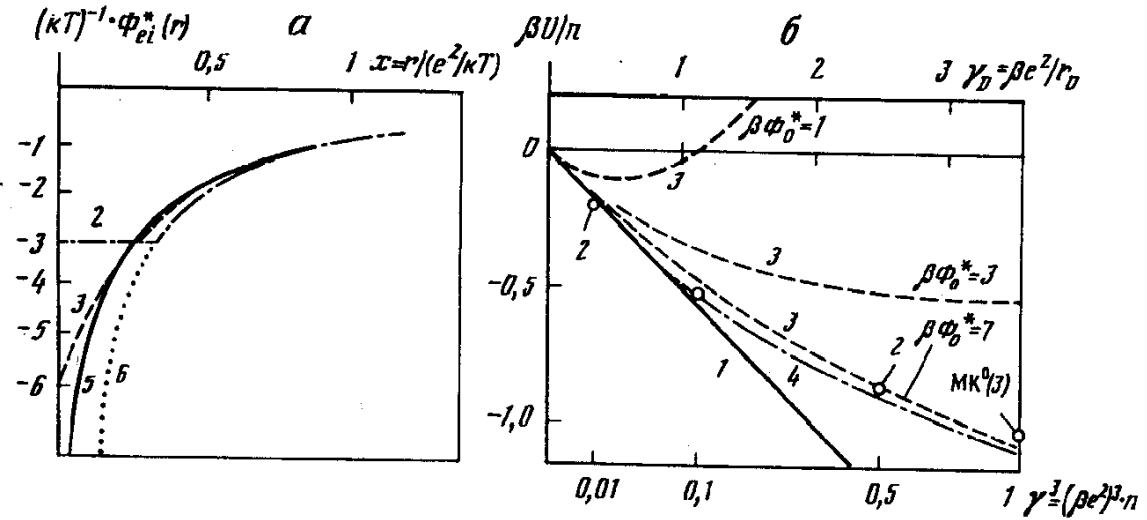


Рис. 5.3: (а)Эффективный электрон-ионный псевдопотенциал плазмы. 2 - псевдопотенциал "нулевого приближения" [50] с глубиной $\beta\Phi_{ei}^*(0) = -3$, 3 - эквивалентный псевдопотенциал Φ_{ei}^* (5.5) ($\beta\Phi_{ei}^*(0) = -6$), 5 - электрон-ионный псевдопотенциал для водорода при $T = 10^3$ K [51], 6 - кулоновский потенциал. (б)Безразмерная конфигурационная энергия подсистемы свободных зарядов [63]. 1 - дебаевское приближение, 2 - конфигурационная энергия из работы [50], рассчитанная методом Монте-Карло для псевдопотенциала "нулевого приближения" Φ_{ei}^* ($\beta\Phi_{ei}^*(0) = -3$), 3 - линейризованное приближение (5.5)-(5.13) для равной глубины псевдопотенциала (б) $\beta\Phi_{ei}^*(0) = -7$, 4 - нелинейное приближение [28] [61] при глубине псевдопотенциала (б) равной $\beta\Phi_{ei}^*(0) = -6$.

- При вычислении эффектов неидеальности в поправках к термодинамическим величинам явным образом учитываются следующий из теоремы вириала сдвиг средней кинетической энергии свободных зарядов $\Delta U_{kin} = 3\Delta pV - \Delta U$.
- Широко используемое соотношение между поправками к давлению и внутренней энергии свободных зарядов - $\Delta U = 3\Delta pV$, оставаясь справедливым в области слабой неидеальности, более не сохраняется в области заметной неидеальности ($\Gamma \sim 1$). Это является результатом, во-первых, явного учета квантовых эффектов, влияющих на вклад свободных и связанных состояний, а во-вторых, следствием самой процедуры перехода к химической модели, выражающемся в появлении ограничения снизу для импульсов на малых электрон-ионных расстояниях [285], [288]. Качественно указанный эффект приводит к дополнительному, по сравнению с традиционными кулоновскими приближениями и зависящими только от параметра неидеальности, электрон-ионному отталкиванию [288].

Полученный в результате вариант псевдопотенциальной модели [63], [61] приводит к приближению, которое в пределе $\Gamma \rightarrow 0$ ($n \rightarrow 0, T = const$), совпадает с дебаевским, а с ростом плотности, отличается от него меньшими значениями соответствующих поправок, которые в конце концов могут изменить знак и стать положительными при $\sigma/r_D \geq 1$ ¹ На рис. 5.3(а) представлен эффективный электрон-ионный псевдопотенциал плазмы (нормированный на kT) [63].

На рис. 5.3(б) представлена безразмерная конфигурационная энергия (5.11) подсистемы свободных зарядов. Из приведенного на этих рисунках сравнения можно

¹Это является результатом принятого разбиения по сортам, при котором "свободный" электрон, находясь рядом со "свободным" ионом, не может по определению иметь малые импульсы [284].

заключить, что для эквивалентных псевдопотенциалов результаты, получаемые на основе приведенных выше простых соотношений, находятся в удовлетворительном соответствии с результатами прямого численного моделирования методом Монте-Карло [50]. Это можно рассматривать как подтверждение сделанного в [32], [30], [28] вывода, что соблюдение общих соотношений (5.6)-(5.8) является ключевым условием для построения удовлетворительного описания термодинамики сильнонеидеальных кулоновских систем.

5.2.2 Термодинамические модели ударно-сжатого ксенона и цезия

Одними из первых экспериментов по генерации неидеальной плазмы "газового" диапазона плотностей, по-видимому, являются результаты динамического сжатия аргона и ксенона во взрывном генераторе [148], [31], и плазмы цезия на подогреваемой ударной трубе [105], [16], а также в экспериментах с взрывающимися проволочками [45]. Для полученной в этих экспериментах плазмы характерен диапазон удельных объемов $\sim 100 \div 3000 \text{ см}^3/\text{моль}$, что соответствует плотной "газовой" плазме ($\rho \ll \rho_0, nr_e^3 \leq 1$). Параметр "газовости" (ρ/ρ_c) составляет: $\sim 0.01 \div 0.5$ для *Ar*, $\sim 0.05 \div 1.0$ для *Xe* и $\sim 0.0015 \div 0.1$ для *Cs*. Диапазон давлений, достигнутый в экспериментах, составляет $\sim 0.1 \div 50$ кбар, Диапазон энергокладов - ~ 1000 кДж/моль. Диапазон температур (по оценкам) - *Ar* $\sim 15 \div 25 \cdot 10^3 \text{ K}$, *Xe* $\sim 20 \div 50 \cdot 10^3 \text{ K}$, *Cs* $\sim 3 \div 20 \cdot 10^3 \text{ K}$. Полученная в экспериментах плазма невырождена - $n_e \bar{\lambda}_e^3 \leq 1$, умеренно неидеальна ($\Gamma \leq 1$) и одно- или слабо двукратно ионизована.

Известно, что ударно-волновой эксперимент дает информацию лишь об калорическом $U(p, V)$ УРС. Экспериментально наблюдаемой и наиболее близкой к степени ионизации величиной [63], [32] является отношение $(U - 3/2pV)/NI$, которое с точностью до средней энергии возбуждения совпадает со степенью ионизации в идеально-газовой плазме). Указанные выше величины соответствуют таким оценкам [31].

Согласно оценкам экспериментаторов точность измерений в *Ar*, *Xe* составляет: $\Delta V \sim 7 \div 20\%$, $\Delta H \sim 3 \div 5\%$. Оценки точности измерений плазмы цезия, проведенных на подогреваемой ударной трубе, более высоки, в особенности это относится к последней серии экспериментов [16] - $\Delta V \sim \pm(4 \div 6)\%$, $\Delta H \sim \pm(2 \div 5)\%$.

Следует заметить, что точность и разброс экспериментальных данных для *Ar*, *Xe* [13], [148] таковы, что анализ экспериментальных данных позволяет лишь зафиксировать характер и масштаб общего отклонения "в целом", намечая общую тенденцию и не позволяя провести точную селекцию среди множества теоретических моделей, предложенных в литературе для описания частично ионизованной, слабо- и умеренно неидеальной, невырожденной плазмы.

Несмотря на ограниченную точность экспериментальных данных по УРС умеренно неидеальной газовой плазмы, полученной в динамических экспериментах [13], [31], [105], [16], [45], [148] сравнительный анализ этих результатов и результатов многовариантных расчетов с использованием широкого круга имеющихся в литературе приближенных моделей [16], [61], [32], [63], [31] позволяет зафиксировать общую тенденцию - наличие неучтенных дополнительных механизмов эффективного отталкивания по сравнению, например, с используемым в качестве нулевого или опорного приближения (см. §3) расчета с использованием атомной статистической суммы Планка-Ларкина и большинства из предложенных в литературе форм кулоновских

поправок на неидеальность в виде однопараметрической функции от параметра неидеальности Γ [61], [106].

Учет отталкивания в приближении второго (и третьего) вириальных коэффициентов с использованием справочных данных [49], [16], физически отвечающих случаю умеренно высоких температур $kT \leq I_{exc}$ (для аргона и ксенона $I_{exc} \sim I_1$) т.е атому в основном состоянии - не объясняет все экспериментальные данные по Ar и Xe [31], [32].

Для случая частично ионизованной плазмы ксенона были проведены расчеты [31] с использованием указанного выше варианта ППМ [63]. В этих расчетах граница, разделяющая свободные и связанные состояния атома и иона и соответствующее ограничение атомной статистической суммы выбирались на глубине энергии связи kT , что практически совпадает с известной и часто рекомендуемой процедурой вычисления статистической суммы по так называемое формуле Бриллюэна-Планка-Ларкина (см.подробнее [29]). Сравнение показало, что предложенный вариант псевдопотенциальной модели [63] позволяет качественно, и учитывая реальную точность и разброс экспериментальных данных, и количественно описать параметры экспериментально измеренных ударных адиабат ксенона.

В нижней части рисунка 5.4 приведено сравнение экспериментальных данных с результатами настоящих расчетов.

Полученный в модели [63] сдвиг ударных адиабат непосредственно связан в данном случае с наличием в модели явной (положительной) поправки к средней кинетической энергии свободных зарядов, что в терминах УРС эквивалентно в сравнении с большинством традиционных приближений эффекту дополнительного отталкивания.

Аналогичный результат был получен в сравнительных расчетах с использованием модели [63], [61] параметров ударно-сжатой плазмы цезия [105], [16]. В этих экспериментах была достигнута более высокая точность измерений и перекрыт более широкий диапазон давлений и удельных объемов, и что более важно, более широкий диапазон величин параметра плазменной неидеальности Γ (в силу предельно низкой величины потенциала ионизации цезия). Еще одним отличительным свойством

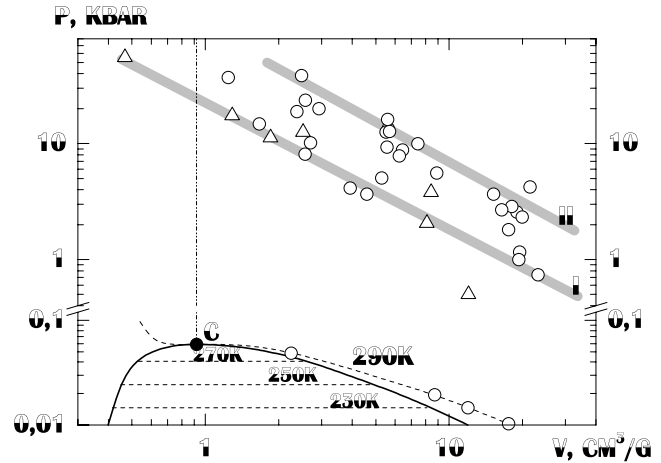


Рис. 5.4: Фазовая диаграмма ксенона (А) и сравнение результатов расчета в модифицированной псевдопотенциальной модели с экспериментальными данными (В). Сравнение экспериментальных данных с результатами настоящих расчетов. Обозначения: - Сплошные кривые - учет взаимодействия заряженных частиц в кольцевом (дебаевском) приближении в большом каноническом ансамбле [101] [29], штрих-пунктир - дополнительный учет взаимодействия атомов в приближении второго вириального коэффициента [16], пунктирные линии - расчет с использованием псевдопотенциальной модели [63] (глубина псевдопотенциала и граница внутриаомных состояний приняты равными $-kT$): а) $p_0 = 1$ атм, б) $p_0 = 10$ атм, в) $p_0 = 20$ атм

экспериментов [16], [105] и сопровождавших их серии расчетно-теоретических работ [105], [145] является, по-видимому, одна из первых (если не первая) реализация известной идеи Я.Б.Зельдовича [53] о восстановлении температуры по результатам ударно-волнового эксперимента. (см.также. [106]). Однако точность восстановленной таким образом температуры и специфический эффект взаимной компенсации различных источников неопределенности в модельном УРС C_s в данном диапазоне параметров, привели к тому, что окончательно пересчитанные "экспериментальные" результаты по термическому $\{p(V, T)\}$ УРС цезия оказались совместимыми практически со всеми теоретическими приближениями, предложенными впоследствии для описания этих экспериментальных данных.

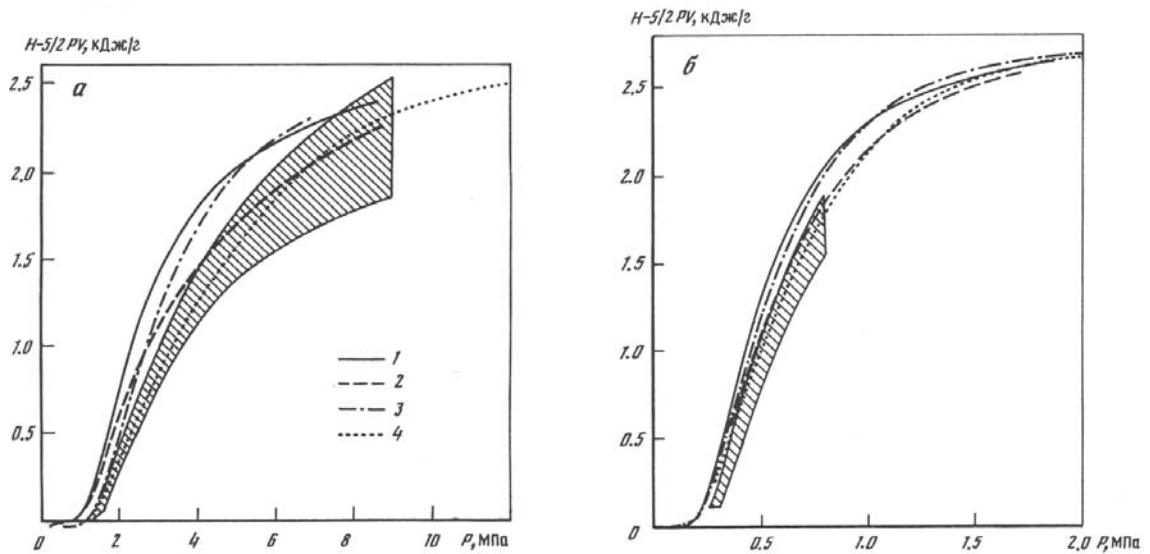


Рис. 5.5: Калорическое уравнение $U(p, V)$ состояния плазмы цезия вдоль изохоры а) $V = 200\text{см}^3/\text{г}$, б) $V = 1000\text{см}^3/\text{г}$. Отмечены значения параметра неидеальности Γ и степени ионизации α , затенена полоса ($\pm 5\%$) для сглаженной экспериментальной зависимости $U(p, V)$ [16]. Обозначения: - 1 - кольцевое (дебаевское) приближение в большом каноническом ансамбле [101], 2 - модифицированная псевдопотенциальная модель (МПМ) [63] при выборе глубины электрон-ионного потенциала и границы внутриатомных состояний, равными $-kT$, 3 - приближение "ограниченного атома" [33], [31], [192], [31], [29], 4 - комбинированное приближение, совмещающее модель МПМ [63] для взаимодействия зарядов и модель "ограниченного атома" [31] для описания для взаимодействия атомов.

Непосредственные же результаты эксперимента [16], [105] в калорическом УРС $H(p, V)$ оказались таковы, что, напротив, результаты большинства из сравнивавшихся предварительных расчетов УРС C_s [145] оказались систематически вне экспериментального коридора вокруг сглаженных экспериментальных данных по $H(p, V)$. Предварительный вывод работы [16], [105] заключается в том, что в подавляющей части охваченного экспериментом диапазона температур и давлений удовлетворительное описание экспериментальных данных удавалось достичь только при полном пренебрежении какими бы то ни было традиционными формами кулоновских поправок на неидеальность в виде однопараметрических функций от Γ , и каких бы то ни было из проверенных в [145] вариантов расчета атомных статистических сумм за исключением самого простейшего, состоящего в учете только основного состояния атома. Такое соотношение теории и эксперимента привело некоторых из анализиро-

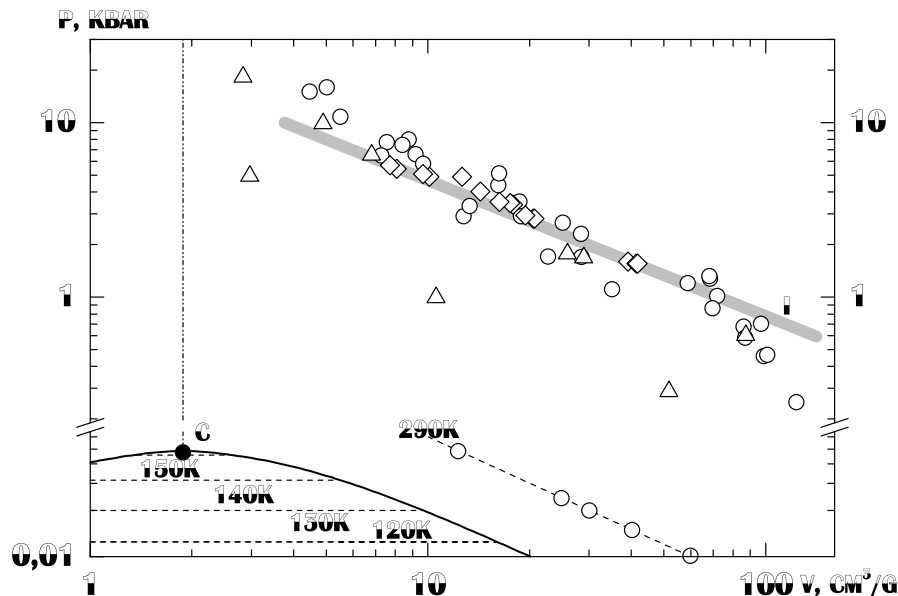


Рис. 5.6: Фазовая диаграмма аргона (А) и сравнение результатов расчета в модели "ограниченного атома" с экспериментальными данными (В)

вавших эти результаты специалистов [79] к выводу о недостоверности результатов эксперимента [16], [105] из-за наличия в них систематической погрешности.

Использование варианта псевдопотенциальной модели [63] позволяет описать основной качественный эффект эксперимента [16], [105] в области с заметной ионизацией - общий сдвиг калорического УРС в сторону соответствующую наличию дополнительного эффективного отталкивания. Однако, такой результат оказался достижим лишь в области с заметной ионизацией цезия. Это объясняется тем, что в варианте модели МПМ [63] основное внимание было уделено заряженным частицам, и вклад атомов был учтен в приближении идеального газа, так что упомянутый выше эффект химической модели - наличие эффективно недоступных взаимных координат и импульсов у всех "свободных" частиц, в том числе и у атомов, - был учтен лишь в описании вклада свободных зарядов. Ниже описано приближение [33], где неучтенный в [63] эффект дополнительного отталкивания нейтральных частиц (атомов) был поставлен на первое место, что привело к дополнительному, и качественно сходному с [63] эффекту, но на этот раз преимущественно в области малых степеней ионизации (см.рис. 5.5).

5.2.3 Модель ограниченного атома для аргона и цезия

Простейшая оценка вклада короткодействующего отталкивания может быть выполнена [49] в рамках приближения второго вириального коэффициента, вычисляемого для потенциала Леннарда - Джонса [16]. Существенно, что характеристики этого потенциала конструируются [113] на основе экспериментальных данных, получаемых при умеренных температурах, когда подавляющее большинство атомов находится в

основном энергетическом состоянии. Приведенное на рис. 5.4 и 5.6 (Фазовая диаграмма аргона [31]. Отмечены границы двухфазной области и критическая точка - "С", 1 - экспериментальные данные [31], 2 - экспериментальные данные работы [148], скорректированные с учетом уравнения состояния реального газа [23] перед фронтом ударной волны, 3 - экспериментальные данные [13], пунктир - изотерма $T = 290$ К (справочные данные [23], штрих-пунктир - изохора $V = V_{\text{крит}}$. Серая полоса - условная граница однократной ионизации - "I") сравнение результатов этих оценок с экспериментальными ударными адиабатами Ar и Xe показывает, что согласие заметно улучшается, тем не менее при больших сжатиях сохраняется систематическое отличие, свидетельствующее о наличии в системе дополнительного отталкивания. В нижней части рисунка 5.6 приведено сравнение экспериментальных ударных адиабат с результатами модельных расчетов.

При характерных для эксперимента высоких температурах и давлениях значительная часть атомов и ионов находится в возбужденных состояниях, параметр короткодействующего отталкивания для которых превосходит соответствующий параметр для атома в основном энергетическом состоянии. Это дает основание предполагать, что в условиях экспериментов [148], [31], [105], [16], [13] под влиянием окружающей среды должна происходить деформация связанных состояний и искажение их вклада в термодинамические функции сжатой плазмы.

Описание этого эффекта требует привлечения квантовомеханической модели, учитывающей воздействие окружения на связанные состояния атомов и ионов в плотной плазме. Расчет водорода в рамках простейшей модели [205], [124] показал, что влияние деформации дискретного спектра начинает проявляться при плотностях приближающихся к плотности вещества в критической точке ($\rho \sim \rho_{cr}$). В работе [56], [31] в рамках метода Хартри-Фока был проведен расчет влияния сжатия на энергетический спектр и волновые функции многоэлектронных атомов и ионов. Рассматривалась феноменологическая модель, в которой влияние окружающей среды на внутриатомные и внутри-ионные электроны приближенно учитывается введением эффективного потенциала

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad \text{при } r < r_c, \quad \text{и } \Phi(r) = \infty \quad \text{при } r \geq r_c. \quad (5.14)$$

Собственные функции и энергии возбуждения атомов и ионов в потенциале (5.14) вычисляются при помощи метода Хартри - Фока. Как известно в этом приближении волновая функция атома ищется в виде линейной комбинации детерминантов, составленных из одноэлектронных волновых функций:

$$\psi_{nlms}(r, \theta, \varphi) = \frac{f_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi) \chi(s).$$

Коэффициенты этой комбинации определяются из условия, чтобы полная волновая функция была собственной для операторов полного орбитального и спинового моментов системы. Применение вариационного принципа квантовой механики приводит к системе уравнений [152]

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + 2V_{nl}(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} - \varepsilon_{nl} \right] f_{nl}(r) = \int_0^{r_c} G_{nl}(r, r') f_{nl}(r') dr' + \sum_{n' \neq n} \varepsilon_{nl, n'l} f_{n'l}(r), \quad (5.15)$$

где $V_{nl}(r)$ - самосогласованный потенциал, действующий на электроны. При вычислении нелокального обменного интеграла в правой части (5.15) не делается дополнительных упрощений. Недиagonальные множители $\varepsilon_{nl,n'l}$ и собственные значения ε_{nlr} определяются из условий

$$f_{nl}(0) = 0, \quad f_{nl}(r_c) = 0, \quad \int_0^{r_c} f_{nl}(r) f_{n'l}(r) dr = \delta_{nn'} \quad (5.16)$$

Второе граничное условие из (5.16) соответствует потенциалу (5.14).

Решение системы (5.15)-(5.16) [56], [33] для различных r_c дает зависимость от этого параметра статистических сумм $Q_i(T, r_c)$, используемых в химической модели при расчете состава и термодинамических функций. При заданных V и T равновесное значение r_c определяется из условия минимума свободной энергии:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial r_c} \right)_{V,T} = 0, \quad \text{где} \quad F \equiv F(\{n_j\}, V, T) = \quad (5.17)$$

$$= kT \left\{ N_e \ln \frac{n_e \Lambda_e^3}{2e} + \sum N_k \ln \frac{n_k \Lambda_k^3}{e Q_k(r_c)} \right\} + \Delta F_{Coul}(\{n_j\}, V, T) + \Delta F_{hs}(\{n_j\}, r_c, V, T)$$

$$\Delta F_{hs}(\{n_j\}, r_c, V, T) = -N_a kT f(y), \quad f(y) = y \frac{4 - 3y}{(1 - y)^2}, \quad y = \frac{4\pi n_a r_c^3}{3} = n_a v_a, \quad (5.18)$$

$$\frac{\Delta p_{hs}}{n_a kT} = y f'(y) = 2y \frac{2 - y}{(1 - y)^3}, \quad \frac{\Delta \mu_{hs}}{kT} = f(y) + y f'(y) = y \frac{3y^2 - 9y + 8}{(1 - y)^3}. \quad (5.19)$$

Свободная энергия зависит от r_c с одной стороны через статистические суммы атомов и ионов $Q_i(T, r_c)$, с другой - через поправку ΔF_{hs} , приближенно описывающую эффективное короткодействующее отталкивание связанных комплексов в приближении твердых сфер [167].

В отличие от традиционных ячеечных моделей сжатого вещества [48], [80], [84], [117], [273], [58], [157], данное приближение построено в рамках квазихимического способа описания с явным учетом поступательных степеней свободы всех сортов частиц. Подчеркнем, что в рассматриваемой модели все электроны разделены на два сорта и находятся как внутри, так и вне ячеек, а объем, занимаемый атомной или ионной ячейкой $V_i = 4\pi r_c^3/3$, составляет лишь часть среднего объема, приходящегося на ядро. В то же время в работе [197] при вычислении статистических сумм частице приписывается полный объем, приходящийся на одну частицу, а при вычислении твердосферного отталкивания в ΔF_{hs} (5.17) - объем гораздо меньший, тот начиная с которого заметно сдвигается основное состояние. В работе [168] установлено, что выбор радиуса ячейки r_c такой, чтобы рассчитанный первый максимум радиальной функции распределения системы твердых сфер совпал с экспериментально измеренным для плотности в точке плавления, приводит для целого ряда металлов к очень близким значениям соответствующего параметра упаковки $\nu(T_{melt}) \equiv n_{melt}(4\pi r_c^3/3) \sim 0.45$. На рис. 5.7 обозначения: 1 - результаты эксперимента [13], [148], 2 - расчет для каждой экспериментальной точки удельного объема V (P_{exp}, T_{exp}) с использованием для заряженных частиц кольцевого (дебаевского) приближения в большом каноническом ансамбле [101], [29], 3, 4, 5 - расчетные изотермы $T = 16000$ К и 20000 К в приближениях: 3 - расчет с использованием псевдопотенциальной модели [63] (глубина псевдопотенциала и граница внутриатомных состояний

приняты равными - $k_B T$), 4 - приближение 2 с дополнительным учетом второго и третьего вириальных коэффициентов аргона [16], 5 - расчет по модели "ограниченного атома" [32], [192], [31].

Оно показывает, что полученный сдвиг адиабат Гюгонио в целом правильно отражает проявляющуюся в экспериментах на Ar и Xe тенденцию, однако несколько завышает реальную величину эффекта, зафиксированного в [31], особенно при плотностях, близких к критическим. Это, по-видимому, объясняется тем, что принятое в описанной выше модели твердосферное отталкивание переоценивает реальное отталкивание между атомами на близких расстояниях, для количественного описания которого более адекватной, по-видимому, является модель "мягких" сфер (например, [206], [261]).

Вариационная процедура, использованная в работе [31] термодинамически более последовательна. Дополненная стандартной техникой расчета термодинамического равновесия [29] эта процедура была использована в [31] для вычисления ударных адиабат аргона. Сравнение этих результатов с экспериментальными данными приведено на рис. 5.7.

В работе [31] самосогласованная вариационная процедура для Ar была реализована не полностью. В нее были вовлечены лишь атомные составляющие полной зависимости свободной энергии от положения граничного радиуса r_c разделяющего по координатному признаку свободные и связанные состояния. Ввиду этого результирующий эффект сказывался прежде всего при низких степенях ионизации. В свою очередь, в реализованной в работе [63] псевдопотенциальной модели основной эффект был учтен, напротив, лишь для свободных зарядов. Для калорического УРС цезия в диапазоне параметров, перекрытом в эксперименте на подогреваемой ударной трубе [16], [105] был проведен расчет, соединяющий оба указанных выше подхода. Соответствие данных расчета и эксперимента в калорическом УРС цезия свидетельствует о важности специфического для химической модели эффекта, которому уделено внимание в обоих подходах - явного ограничения фазового объема, отведенного по определению для реализации связанных состояний составных частиц. Вместе с тем следует отметить, что приближение твердой стенки (граничное условие "скорлупы" (5.16) моделирующее в потенциале (5.14) действие плотного плазменного окружения на связанные состояния с одной стороны, и описываемая поправкой Карнахана - Старлинга (5.18) взаимная "непроницаемость" свободных комплексов, с

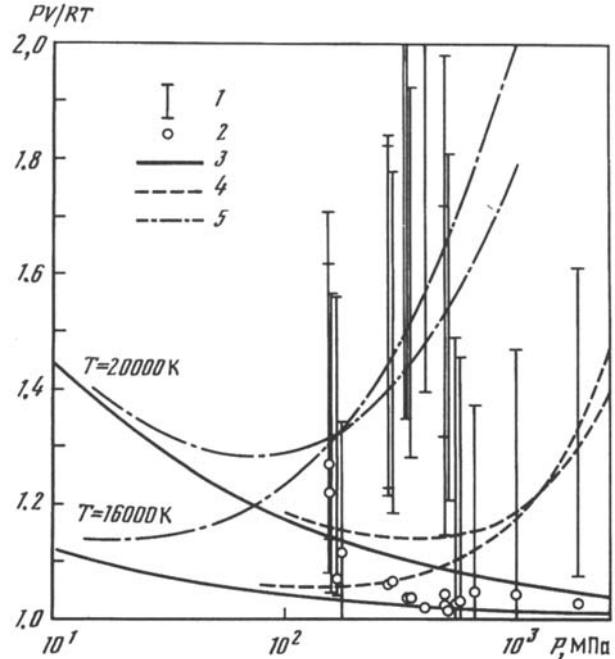


Рис. 5.7: Термическое уравнение состояния плазмы аргона в диапазоне параметров $P=1 \div 20$ kbar, $T=5000 \div 23000$ K [32]. Сравнение результатов модельных расчетов с экспериментальными данными по ударному сжатию.

другой, - слишком грубы и качественны. В результате этого суммарное эффективное отталкивание в модели оказывается завышенным. Это сказывается на термическом УРС как At так и C_s , где использование МОА приводит при экстраполяции модели в область высоких лотностей к завышенным давлениям. Это позволяет описать часть полученных для аргона измерений температуры [148], [13] (См.рис. 5.7) и Главу 4 в работе [32]).

Однако это не может воспроизвести результаты температурных измерений полностью. Следовательно дальнейшие усилия по усовершенствованию модели ограниченного атома должны быть направлены на переход к более реалистичным моделям эффективных внутри- и внеатомных потенциалов химической модели.

Следует отметить, что приведенные на рис. 5.7 результаты прямого измерения термического уравнения состояния аргона [148], [13] имели недостаточно высокую точность, в результате чего главным содержательным результатом этих экспериментов прежде всего следует считать фиксацию общей качественной тенденции - заметного влияния дополнительных механизмов отталкивания, не учтенных в большинстве моделей, используемых в прикладных расчетах. Тот же вывод независимо следует из анализа результатов измерения калорического уравнения состояния аргона, осуществленных в тех же экспериментах [148], [13] параллельно с измерением термического уравнения состояния. Результаты сравнения теории и эксперимента для всей совокупности данных, полученных в [148], [13], приведены на рис. 5.8. Сравнение отчетливо демонстрирует общий сдвиг экспериментальных данных в сравнении с результатами расчета. В данных координатах такой сдвиг может быть воспроизведен, как совместный результирующий эффект отсутствия вклада возбужденных состояний и отсутствия традиционных притягивательных по своему характеру кулоновских поправок [32], [61].

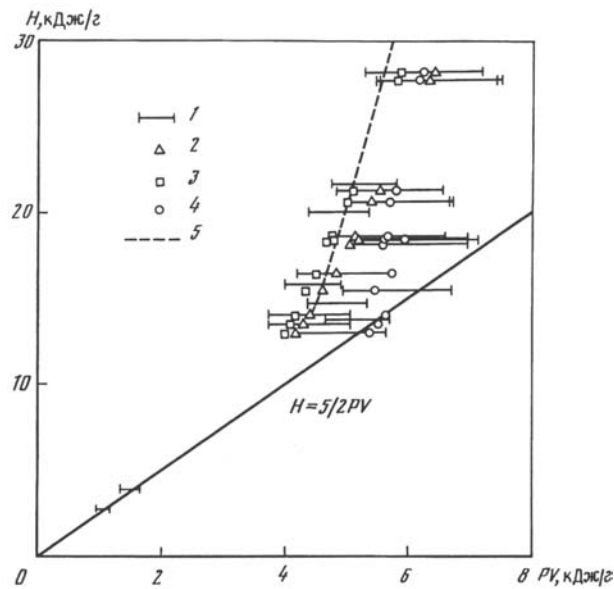


Рис. 5.8: Калорическое уравнение состояния плазмы аргона. Сравнение экспериментальных данных по ударному сжатию с результатами модельных расчетов [32]: 1 - результаты эксперимента [56],[61], 2, 3, 4 - расчет для каждой экспериментальной точки удельного объема $V(P_{exp}, H_{exp})$ в следующих приближениях: 2 - по псевдопотенциальной модели [63] (глубина псевдопотенциала и граница внутриатомных состояний приняты равными - $k_B T$), 3 - расчет с использованием для заряженных частиц кольцевого приближения в большом каноническом ансамбле [101], [29], 4 - модель "ограниченного атома" [32], [192], [31], 5 - расчетная изотерма $T = 20000$ K с использованием модифицированной псевдопотенциальной модели [63].

Сравнение отчетливо демонстрирует общий сдвиг экспериментальных данных в сравнении с результатами расчета. В данных координатах такой сдвиг может быть воспроизведен, как совместный результирующий эффект отсутствия вклада возбужденных состояний и отсутствия традиционных притягивательных по своему характеру кулоновских поправок [32], [61].

5.2.4 Ударные адиабаты пористых металлов (*Ni, Fe, Cu*)

Описанная выше полная вариационная процедура, явно учитывающая особенность химической модели вещества в приложении к области высоких плотностей - ограничение фазового объема, отведенного по определению для реализации связанных состояний составных частиц - достаточно сложна и громоздка в формальном отношении. для проведения предварительной проверки экстраполяционных возможностей химической модели в области высоких и сверхвысоких плотностей было сочтено целесообразным использовать упрощенный вариант, качественно отражающий основные особенности полной вариационной процедуры реализации модели ограниченного атома. Такой вариант [34], [36], [38], [201], [37] был использован для исследования важного с физической точки зрения диапазона температур и давлений, соответствующего плотностям промежуточным между случаями разреженной газовой плазмы с одной стороны, и нормального или даже сжатого состояния вещества, с другой. В использованной в [192] образной терминологии эта область соответствует предполагаемому положению, "дна" так называемое "долины неидеальности", и экспериментально достигается при ударном сжатии пористых образцов конденсированного вещества (см.рис. 5.1, 5.2). В этом упрощенном варианте модели были использованы следующие составляющие полного термодинамического приближения:

- Свободная энергия квазинейтральной смеси электронов, ионов и атомов может была записана в виде вклада идеально-газовой компоненты и члена, ответственного за межчастичное взаимодействие

$$F \equiv F_i^0 + F_e^0 + F_{ii,ie,ee,\dots}^{int}. \quad (5.20)$$

Предполагалось, что атомы и ионы подчиняются Больцмановской статистике, а их вклад имеет стандартный идеальногазовый вид 5.1 :

- Электроны рассматривались как частично вырожденный идеальный Ферми-газ:

$$F_e^0 = 2VkT\pi^{-1/2}\bar{\lambda}_e^{-3} \left[(\mu_e/kT)I_{1/2}(\mu_e/kT) - (2/3)I_{3/2}(\mu_e/kT) \right], \quad (5.21)$$

$$\frac{p_e^0}{n_e kT} = \frac{2 I_{3/2}(\mu_e/kT)}{3 I_{1/2}(\mu_e/kT)}. \quad (5.22)$$

Электронная плотность n_e и химический потенциал μ_e связаны соотношением

$$n_e \bar{\lambda}_e^{-3} = 2\pi^{-1/2} I_{1/2}(\mu_e/kT), \quad I_t(x) = \int_0^\infty \frac{y^t dy}{[1 + \exp(y - t)]}. \quad (5.23)$$

Учет эффектов электронного вырождения весьма важен в этой области фазовой диаграммы, так как параметр вырождения $n_e \bar{\lambda}_e^{-3}$ может достигать нескольких единиц.

Кулоновское взаимодействие учитывалось в рамках модифицированного дебаевского приближения в большом каноническом ансамбле [101], [29]:

$$\frac{\Omega}{VkT} \equiv \frac{F - \sum N_j \mu_j}{VkT} \equiv \frac{p}{kT} = \sum_\alpha n_\alpha - \frac{\tilde{k}_D^3}{24\pi} = \sum_\alpha \left[n_\alpha - \frac{\tilde{\Gamma}}{6} \frac{n_\alpha z_\alpha^2}{1 + z_\alpha^2 \tilde{\Gamma}/2} \right], \quad (5.24)$$

где выраженный через активности кулоновский параметр неидеальности $\tilde{\Gamma}$ определяется из уравнения:

$$\tilde{\Gamma}^2 \equiv \frac{e^2}{kT\tilde{r}_D} = 4\pi \left(\frac{e^2}{kT} \right) \sum_{\alpha} \frac{z_{\alpha}^2}{1 + z_{\alpha}^2 \tilde{\Gamma}/2}. \quad (5.25)$$

Здесь \tilde{r}_D - параметр экранирования, выраженный через активности. Существенно, что параметр неидеальности $\tilde{\Gamma}$ отличается (всегда меньше) от традиционного дебаевского параметра неидеальности $\Gamma = [4\pi(e^2/kT) \sum n_{\alpha} z_{\alpha}^2]^{-1/2}$.

Приближение (5.24), (5.25) эквивалентно классическому приближению Дебая-Хюккеля в пределе ($\Gamma \Rightarrow 0$), но термодинамически устойчиво [61] (см. часть 7.3) при любых сжатиях плазмы (матрица $||\partial\mu_k/\partial n_i||$ положительно определена при любых параметрах).

- Связанные состояния ограничивались на основном состоянии. При этом использовались невозмущенные значения энергий изолированного атомов. Их эффективный сдвиг (как целого) под действием плотного плазменного окружения выступает под видом межчастичного взаимодействия. Уширение под действием интенсивных плазменных микрополей не учитывалось.
- Учитывалось короткодействующее отталкивание атом-атом и ион-ион. Вследствие высокой плотности эффект перекрывания электронных оболочек атомов и ионов ведет к появлению отталкивания тяжелых частиц на коротких расстояниях, что описывалось в рамках приближения смеси твердых сфер (так называемое формула Мансури) [242], [223]:

$$\frac{\Delta F_{HS}}{\sum_i n_i kT} \equiv f_{HS}(\nu) = X \frac{\nu}{(1-\nu)^2} + 3Y \frac{\nu}{1-\nu} + (X-1) \ln(1-\nu), \quad (5.26)$$

$$\nu \equiv \frac{4\pi}{3} n \bar{r}^3, \quad X = (\bar{r}^2)^3 (\bar{r}^3)^{-2}, \quad Y = \bar{r}^2 \bar{r}^{-1} (\bar{r}^3)^{-1}, \quad \bar{r}^k = \frac{\sum_i n_i r_i^k}{\sum n_i}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (5.27)$$

Этому соответствуют вклады в давление, энергию и химический потенциал системы:

$$\frac{\Delta p_{HS}}{\sum_i n_i kT} = \frac{\partial f_{HS}(\nu)}{\partial \nu}, \quad \Delta U_{HS} \equiv 0, \quad \frac{\Delta \mu_i}{kT} = f_{HS}(\nu) + \sum_j n_j \frac{\partial f_{HS}(\nu)}{\partial n_i}. \quad (5.28)$$

Дополнительное притяжение

Вычисления в рамках приближения (5.20)-(5.28) демонстрируют вполне приемлемое согласие с экспериментальными ударными адиабатами металлов при больших скоростях ударных волн. Учет короткодействующего отталкивания весьма важен и существенно улучшает это согласие. Но в ограниченной области фазовой диаграммы не существует набора радиусов r_i , который позволил бы описать экспериментальные данные в рамках указанного приближения. Это объясняется тем, что (5.20)-(5.28) не содержит механизма, учитывающего энергию связи, ответственной за существование конденсированного состояния вещества. Этот эффект учитывался включением дополнительного притяжения, которое учитывалось в виде следующих эффективных поправок:

$$\Delta F = \Delta U = -A \left(\sum N_i \right)^{1+\delta} \cdot V^{-\delta}, \quad \Delta p = \delta \left(\frac{\Delta U}{V} \right),$$

$$\Delta\mu_i = -1(1 + \delta)V^{-\delta} \left(\sum N_i \right)^\delta \quad A, \delta = const. \quad (5.29)$$

В приближении (5.29) суммирование производится либо для атомов, либо по всем атомам и ионам.

С использованием описанного выше упрощенного варианта теоретической модели были рассчитаны параметры ударного сжатия пористых образцов ряда металлов. Ожидалось, что наиболее благоприятным для приложения химической модели окажутся случаи металлов, где в экспериментах удавалось достичь ударного сжатия образцов с максимально высокими пористостями, и соответственно с минимальными плотностями, доступными при сжатии конденсированных образцов. Поэтому особое внимание было уделено экспериментам с плазмой никеля и меди [128]. Также были проведены расчеты параметров ударного сжатия пористого железа и свинца [128].

Для практической реализации расчетов с использованием указанной выше модели необходимо решить вопрос выбора входящих в модель величин "собственных объемов" - размеров всех частиц, прежде всего атомов (молекул) и ионов различной кратности, которые должны выступать в упрощенном варианте модели взамен полной вариационной процедуры. В расчетах [38], [201], [37] использовались два подхода. В первом использовались результаты проделанных в работе [34] расчетов методом Хартри-Фока энергии основного состояния ионов меди $Cu^{+2} \div Cu^{+7}$ в условиях ограниченной ячейки. Эти расчеты показали, что для каждой кратности иона его энергия, рассчитанная в потенциале (5.14) (ион в "скорлупе") начинает резко возрастать при сжатии, начиная с некоторого, различного вообще говоря для разной кратности иона, расстояния. При этом величина так определяемого собственного размера монотонно падает с ростом кратности ионизации иона, так что отношение соответствующих размеров сохраняется приблизительно постоянным.

$$\frac{r_c^{(z+1)}}{r_c^{(z)}} \cong const < 1. \quad (5.30)$$

Экстраполяция этого отношения (5.30) на атом и первый ион меди позволяет связать радиусы всех ионов с одним опорным размером, в качестве которого в данной модели выступает радиус атома. Выбор этой центральной величины оказывается чрезвычайно важным и определяющим для результатов всех последующих термодинамических расчетов (см [34], [35]). Ввиду этого обстоятельства для выбора опорного размера в работах [38] использовался полуфеноменологический подход [168]. В соответствии с ним наилучшим с точки зрения воспроизведения экспериментально измеренного структурного фактора жидкого металла в точке плавления оказался размер, обеспечивающий приблизительно одинаковое для всех металлов значение для так называемое параметра упаковки - безразмерной плотности системы твердых шаров, используемых для описания короткодействующего отталкивания,

$$\nu^* \equiv n \left(\frac{4\pi}{3r_c^3} \right) \cong 0.5. \quad (5.31)$$

Это условие было использовано для определения атомных радиусов r_c металлов по величинам их известной нормальной плотности. Это дало для Cu, Ni, Al, Pb и Fe следующие значения радиусов:

Металл	Cu	Ni	Al	Pb	Fe
r_c (a.e.)	2.00	2.00	2.27	2.80	2.05

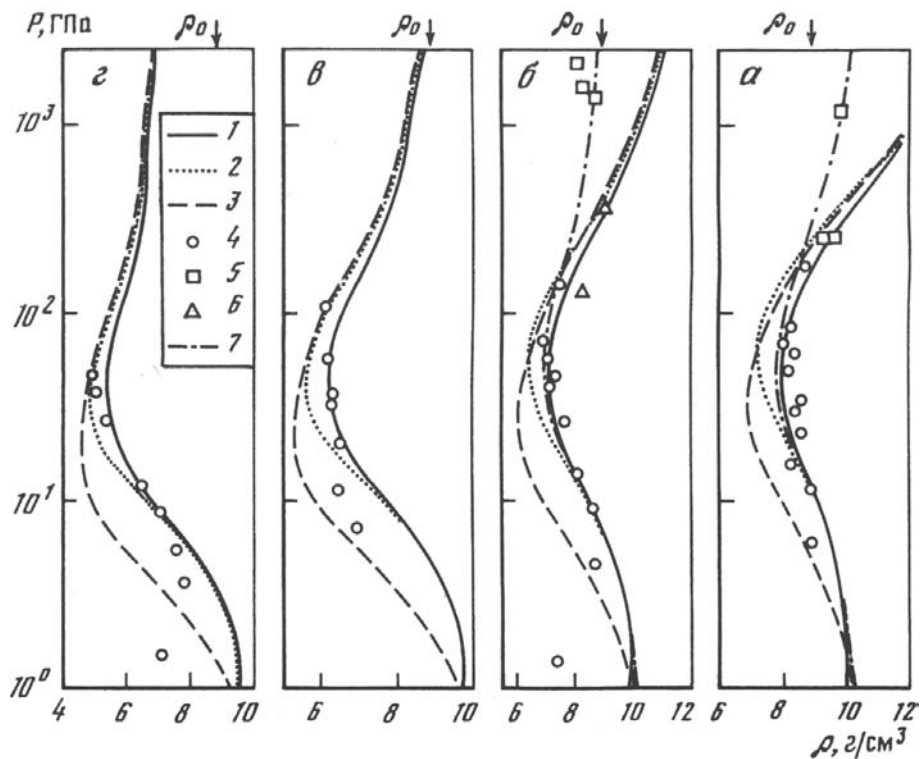


Рис. 5.9: Ударные адиабаты пористой меди. Сравнение экспериментальных данных с результатами приближенных расчетов. (а) $m \equiv \rho_0/\rho_{00} = 3$, 1 - расчет согласно (28-38), суммирование в (38) по всем тяжелым частицам, 2 - то же, но суммирование только по атомам, 3 - "металлический" тип связи ($\delta = 1/3$), суммирование по всем тяжелым частицам, 4 - экспериментальные данные [92], 5 - экспериментальные данные [55], 6 - расчет по модели (26-36) с измененными радиусами атома и ионов: r_c (атом) = 2.0 а.е., $R_C(Cu^{+1} \div Cu^{+3}) = 1.75$ а.е. (б) $m = 4$. 1 - 5 - то же, что и в а), 6 - экспериментальные данные [94], (с) и (д) - $m = 5.5$ и $m = 7.2$

На рис. 5.9 приведены результаты расчетов параметров ударных адиабат пористой меди.

Наряду с описанной выше процедурой выбора собственных размеров тяжелых частиц, представляется целесообразным проверить возможности значительно более простого и удобного в прикладном отношении приближения, использующего легко доступную индивидуальную информацию, уже включенную в расчеты химической модели - совокупность потенциалов ионизации атома и ионов. Точнее, для определения отношения собственных размеров атома и ионов используются отношения величин размеров так называемое "классически доступных областей" [103], [102], отвечающих простому соотношению. Величина же опорного радиуса "атома" как и прежде определялась из соотношения отвечающего правилу Ашкрофта-Лекнера [168].

По сравнению с предыдущей процедурой совокупность определенных таким образом радиусов, как-правило, также представляет из себя монотонно убывающую последовательность, однако с заметными осцилляциями. Они в какой-то степени отражают индивидуальную оболочечную структуру каждого элемента. Для *Ni, Cu, Pb, Al* и *Fe* такой подход дает следующую последовательность радиусов (в атомных единицах), представленную в таблице "Эффективные размеры атома и ионов металлов в

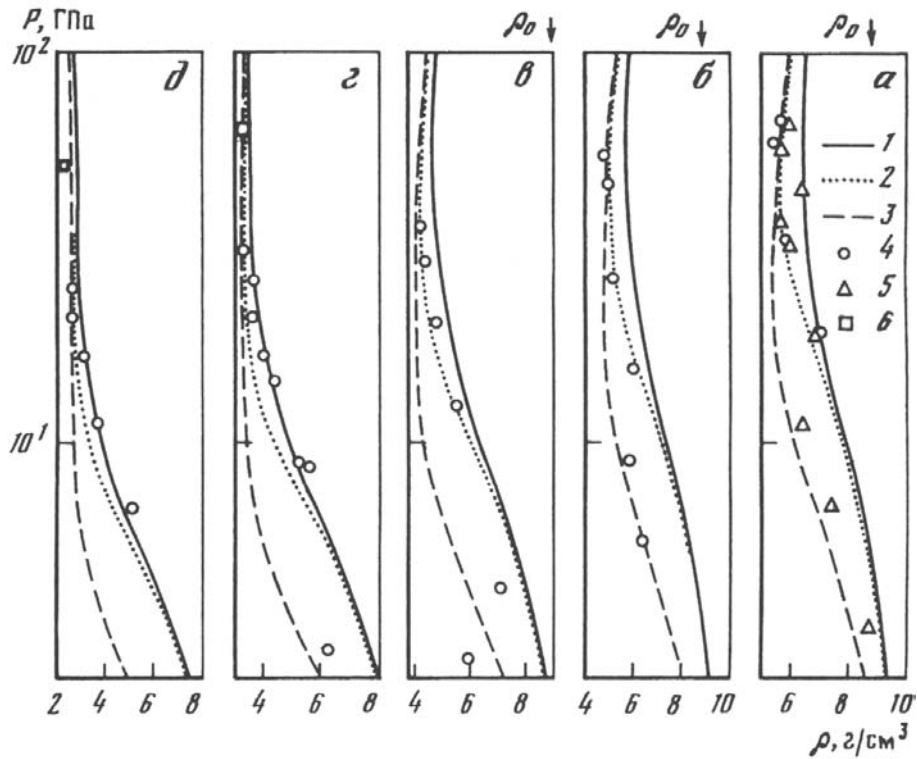


Рис. 5.10: Ударные адиабаты высокопористого никеля ($m = 5, 7, 10, 15, 20$) [201]. а) $m \equiv \rho_0/\rho_{00} = 5.45$. 1 - расчет согласно (28-38), суммирование в (38) по всем тяжелым частицам, 2 - то же, но суммирование только по атомам, 3 - "металлический" тип связи ($\delta = 1/3$), суммирование по всем тяжелым частицам, 4 - экспериментальные данные [137] [138], $m = 5.62$, б) $m = 7.2$ в) $m = 10$ д) $m = 15$ е) $m = 20$, 5 - последние экспериментальные данные [39].

рамках "нулевого варианта" химической модели плазмы (4.30)-(1.11) при ее экстраполяции в область плотной плазмы" $Z^{(i+1)}e^2/r_c^{(i)} = I^{(i)}$.

$Z^{(i)}$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
<i>Cu</i>	2.00	1.700	1.55	1.40	1.25	1.10	0.95	0.8					
<i>Ni</i>	2.00	1.684	1.27	1.10	1.00	0.84	0.80						
<i>Pb</i>	2.80	2.800	1.96	1.96	75	1.60							
<i>Al</i>	2.27	1.45	1.25	1.10	1.00	0.92	0.84	0.78	0.71	0.61	0.5	0.2	0.1
<i>Fe</i>	2.27	2.00	1.58	1.18	1.075	0.978	0.904						

Результаты расчета параметров пористых ударных адиабат железа и никеля, рассчитанных с использованием приведенных выше "собственных размеров", приведенных в таблице "Эффективные размеры атома и ионов металлов", представлены на рис. 5.10 и 5.11. На рис. 5.12 отдельно проиллюстрировано влияние разных составляющих принятого варианта химической модели на положение окончательной ударной адиабаты на примере адиабаты никеля с пористостью $m = 10$.

Проведенное сравнение демонстрирует прежде всего два важных факта:

- Ключевым условием для достижения даже примерного соответствия результатов расчета с данными эксперимента в области высоких давлений является учет интенсивного короткодействующего отталкивания атома и ионов на близких расстояниях, в отсутствие которого химическая модель заметно переоценивает зна-

чения плотности, достигаемые в ударном сжатии.

- В отсутствии члена (5.29), эффективно учитывающего механизм, обеспечивающий энергию связи металла, рассматриваемая химическая модель не описывает область пониженных давлений на ударной адиабате ни при каком выборе радиусов атома и ионов. Ввиду полуфеноменологического характера поправочных членов (5.29) представленный вариант химической модели в этой области пониженных давлений имеет характер экстраполяционного уравнения состояния.

В целом сравнение расчетных и экспериментальных данных для никеля и меди показывает, что используя это предельно упрощенное приближение, химическая модель позволяет удовлетворительно описать экспериментальные данные по ударному сжатию образцов достаточно высокой пористости. Причем, как и ранее, экстраполяционные возможности химической модели при одних и тех же давлениях постепенно ухудшаются по мере продвижения в область адиабат меньшей пористости и соответственно более высоких плотностей.

Подтверждением этого является тот факт, что среди приведенных на рис. 4.10 результатов две экспериментальные точки, соответствующие максимальным давлениям на адиабатах с $m = 15$ и $m = 20$ были опубликованы [39] после проведения основной процедуры расчета ударных адиабат пористого никеля, результаты которых представлены на рис. 4.10. Хорошее совпадение новых данных с результатами ранее проведенных расчетов служит дополнительным доказательством правильности исходных предпосылок, заложенных в процедуру расчета пол обобщенной химической модели с целью расширения ее экстраполяционных возможностей. Следует подчеркнуть, что полученные дополнительно обсуждаемые экспериментальные данные соответствуют не только максимальным (для данного диапазона пористости никеля) давлениям ($p \sim 50$ ГПа) но и, согласно настоящим расчетам, максимальным среди экспериментально достигнутым (для ударно сжатой плазмы никеля) температурам и степеням ионизации. Это иллюстрируется в таблицах 5.1 и 5.2, где помимо экспериментальных данных приведен набор расчетных термодинамических характеристик, соответствующих экспериментально достигнутой области фазовой диаграммы никеля.

Сравнение экспериментально измеренных и рассчитанных термодинамических характеристик плазмы никеля, полученной ударным сжатием сверхпористых образцов никеля ($m \equiv \rho_0/\rho_{00} = 15$ и 20) [203], где используются обозначения: D, U - волновая и массовая скорости, p, ρ, H, S - давление, плотность, удельная энтальпия

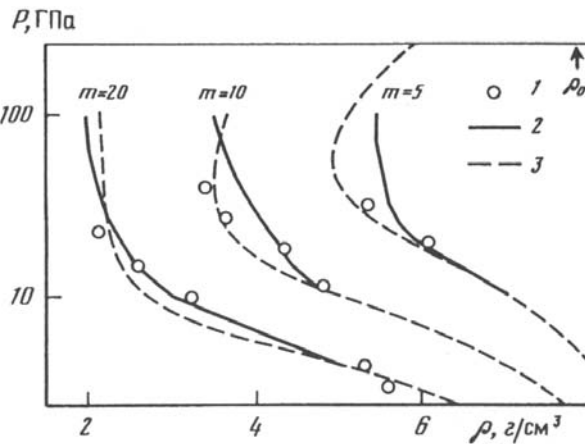


Рис. 5.11: Экстраполяция модифицированной псевдопотенциальной модели [63] в область плотной плазмы. Ударные адиабаты сверхпористого железа ($m = 5, 10, 20$) [203]. 1 - экспериментальные данные [39], 2 - расчет в "нулевом приближении" обобщенной химической модели плазмы (28)-(38), 3 - расчет с использованием модифицированной псевдопотенциальной модели (11)-(19) [41]. Стрелка - нормальная плотность железа.

и энтропия никеля, a - скорость звука, X_i - равновесный ионный состав плазмы, $\Gamma \equiv e^2/kTR_D$ - параметр неидеальности, $\lambda_e^2 \equiv h^2/2\pi m_e kT$ - тепловая длина волны де-Бройля, $Gr \equiv [\rho(\partial H/\partial p)_\rho - 1]^{-1}$ - параметр Грюнайзена.

	D , км/с	U , м/с	p , кбар	ρ , г/см ³	H , кДж/г	T , К	Γ	$n_e \lambda_e^3$
Эксп - т [39]	11.5	9.36	637	3.18	56.65	-	-	-
Теория (11-19)	11.5	9.33	637	3.08	56.97	53300	7.1	1.49
	X_e	X_a	X_+	X_{+2}	X_{+3}	a , км/с		S , Дж/гК
	0.583	0.094	0.064	0.254	0.003	6.32	0.58	3.922

Таблица 5.1: $Ni(\rho_{00} = 0.592\text{г/см}^3, m = 15)$

	D , км/с	U , м/с	p , кбар	ρ , г/см ³	H , кДж/г	T , К	Γ	$n_e \lambda_e^3$
Эксп - т [39]	11.9	9.74	516	2.42	61.6	-	-	-
Теория (11-19)	11.9	9.76	516	2.48	61.3	54000	6.4	1.24
	X_e	X_a	X_{+1}	X_{+2}	X_{+3}	a , км/с		S , Дж/гК
	0.596	0.076	0.061	0.263	0.003	6.23	0.52	4.075

Таблица 5.2: $Ni(\rho_{00} = 0.444\text{г/см}^3, m = 20)$

Проделанное сравнение экспериментальных и расчетных данных позволяет сделать вывод, что обсуждаемая химическая модель вещества является достаточно гибкой и обладает вполне приемлемыми экстраполяционными свойствами для описания параметров ударного сжатия вещества в широком диапазоне параметров. Помимо традиционной области применимости химической модели - области достаточно разреженной "газовой" плазмы - он включает в себя также и перекрываемую в динамических экспериментах область так называемое расширенных металлов. Следует подчеркнуть, что, как показывает детальное сравнение расчетных и экспериментальных данных, ключевую роль при этом играет включение в исходную химическую модель плазмы эффекта короткодействующего отталкивания тяжелых частиц.

На важную роль этого эффекта, описываемого в приближении твердых сфер, было обращено внимание в работе [34]. В дальнейшем близкое по смыслу утверждение делалось в работе [118] в отношении использования приближения твердых сфер для

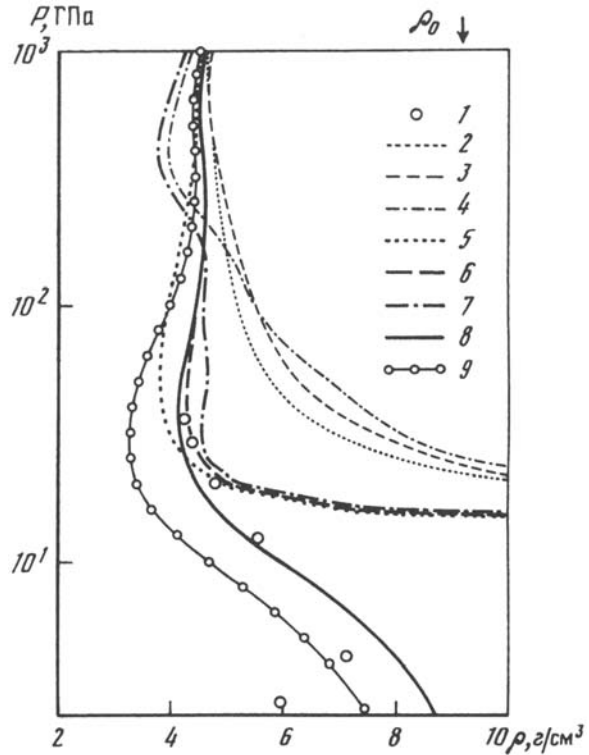


Рис. 5.12: Влияние различных каналов неидеальности на положение ударной адиабаты плазмы никеля ($m = 10$). Ударная адиабата пористого никеля ($m \equiv \rho_{00}/\rho_0 = 10$).

вычисления вклада ядер в традиционной ячеечной модели ударно-сжатого вещества. Плодотворным также является использование приближения твердых сфер при экстраполяции химической модели для описания плотной СНП традиционной для астрофизических приложений плотной водород-гелиевой плазмы [223]. Следует подчеркнуть, что как уже говорилось ранее удовлетворительное описание калорического уравнения состояния не гарантирует адекватного описания термического УРС, а также воспроизведения структурных характеристик вещества, в первую очередь равновесного состава.

На рис. 5.12 представлено влияние различных каналов неидеальности на положение адиабаты [201]. 1 - экспериментальные данные [201], 2-9 - модельные расчеты. 2 - приближение идеальной плазмы с атомами и ионами в основном состоянии ("приближение САХА"), 3 - то же с дополнительным учетом кулоновской поправки (3)-(6), 4 - то же что и 3 с расчетом атомных и ионных статистических сумм в приближении Планка-Бриллюэна-Ларкина, 5, 6, 7 - то же, что и 2 с дополнительным учетом короткодействующего отталкивания в приближении смеси твердых сфер (7)-(9), 8 - то же, что и 2 с учетом дополнительным короткодействующего притяжения в приближении (1-12) 8 - с $\delta = 1$, только для атомов, 9 - то же (8) с диаметрами атома и ионов увеличенными на 20%.

5.2.5 Термодинамика экстремально сжатых металлов (*Al, Ni, Fe, Cu*)

Условия применимости обсуждаемого модернизированного варианта химической модели тем лучше, чем меньше плотность вещества при одной и той же температуре (давлении). Существует, однако, другой предел, когда указанная модификация химической модели позволяет достичь удовлетворительных результатов. Он соответствует условиям сверхсильных сжатий, т.е. области предельно высоких степеней нагрева (температур). Такие условия достигаются в экспериментах [20] со сверхмощными ударными волнами. В этих опытах достигнуты рекордно высокие давления (4 Гбар), температуры ($1 - 7 \cdot 10^6$ К), удельные плотности энергии ($5 \cdot 10^3 - 6 \cdot 10^4$ кДж/г) в алюминии, сжатом в 4-5 раз по сравнению с кристаллографической плотностью. Вследствие крайне высоких температур в условиях эксперимента [20] вещество оказывается в многократно ионизованном состоянии, так что основными механизмами межчастичного взаимодействия (неидеальности) являются кулоновское взаимодействие зарядов и короткодействующее отталкивание ионов на малых расстояния [34] на фоне относительно небольшого вклада от вырождения электронов ($n_e \lambda_e^3 \sim 1$).

В работе [34] в качестве радиуса r_c принималось среднее, не зависящее от температуры и плотности значение, одинаковое для любой кратности ионизации. Для описания поведения вещества в широкой области температур и давлений (10 - 4000 Мбар) необходимо учитывать зависимость радиуса ионов от параметров плазмы. Такая зависимость обусловлена последовательной ионизацией электронных оболочек атома с ростом температуры, увеличением кратности ионов и соответствующим уменьшением характерного размера тяжелых частиц.

Для оценки соотношения между радиусами ионов различной кратности были проведены расчеты электронной структуры основных и нескольких низлежащих возбужденных состояний атома и всех ионов *AlI - AlXIII* методом Хартри-Фока [192], [195]. Расчет ударных адиабат сильно сжатой меди [34] показал, что наилучшее описание достигается при радиусах, несколько меньших, чем радиусы, при ко-

торых происходит ионизация соответствующей атомной структуры за счет сжатия. При описании ударно-сжатой плазмы алюминия приняты радиусы ионов (в атомных единицах), приведенные в таблице "Эффективные радиусы ионов алюминия согласно результатам работы [195]":

N иона	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$r_c^{(i)}$	2.27	1.45	1.25	1.10	1.00	0.92	0.84	0.78	0.71	0.61	0.50	0.20	0.10

Зависимость $r_c^{(i)}$ от кратности ионизации определяет характерный вид конфигурационной части поправок к химическим потенциалам атома и ионов (5.28), которому соответствует принципиальный сдвиг в сторону большей кратности ионизации по сравнению с [34], где полагалось $r_c^{(i)} = r_c = const$.

Анализ и сопоставление влияния на вид рассчитанных ударных адиабат различных значений $r_c^{(i)}$ (при $r_c^{(i)} = r_c = const$) и других плазменных эффектов показывает [35], что как и в условиях [34], в случае плазмы алюминия ультравысоких параметров наиболее существенным оказывается вклад короткодействующего отталкивания. Вариации $r_c^{(i)}$ в пределах 10 - 20 % радикальным образом влияют на вид ударной адиабаты [35], в то время как эффекты, связанные с электронным возбуждением и вырождением электронов, как и в [34], вносят существенно меньший вклад в суммарные термодинамические величины. Параметр плазменной неидеальности $\Gamma \cong 1$, вследствие чего использовалось дебаевское приближение в большом каноническом ансамбле для описания кулоновских эффектов.

На рис. 6.16 (НКС - невырожденная классическая система, СКС - сильновырожденная классическая система) представлено сравнение экспериментальных данных [20], [5], [126] и расчетов по моделям [58], [117], [79] с расчетами по предлагаемой модели, учитывающей взаимодействие заряженных частиц, эффекты вырождения электронов, электронное возбуждение и короткодействующее отталкивание ионов.

Отметим, что учет короткодействующего отталкивания ионов на основе модели твердых сфер (5.18)-(5.19) также позволил добиться существенно лучшего описания

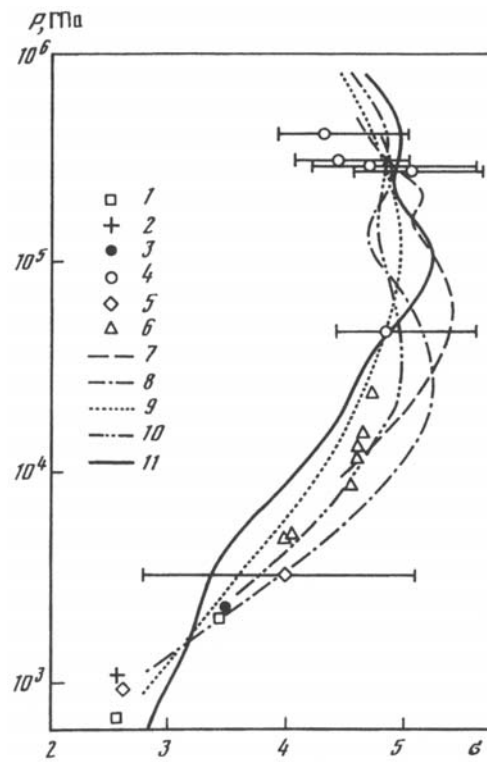


Рис. 5.13: Ударная адиабата сплошного алюминия ($m = 1.0$) в области экстремальных сжатий. Экспериментальные данные: 1 - [79], 2 - [11] [63], 3 - RRY83, 4 - [20], 5 - [126], 6 - [5], Расчетные данные: 7 - INFerno [290], 8 - МХФС [117], 9 - ТФПК [80], 10 - ССП [58], 11 - данные настоящего расчета в модели ограниченного атома согласно (28-38)

ударных адиабат алюминия и в рамках модифицированной модели Хартри - Фока - Слэтера [119]. Таким образом, можно предположить, что в рассмотренной области ультравысоких давлений и температур плазмы конкретный способ описания электронов в атомных ячейках оказывается для термодинамики сравнимым или даже менее существенным по сравнению с учетом отталкивания ионов на близких расстояниях.

Попытки экстраполяции химической модели на область экстремальных сжатий (т.е. ультравысоких давлений и температур (предпринимались помимо алюминия также и для плазмы железа [203] и никеля [137]. В случае железа использовался модифицированный вариант псевдопотенциальной модели, описанный в разделе 7.2.4, обобщенный на случай многократной ионизации. Учитывая высокий уровень плотностей, достигнутый при сверхсильном ударном сжатии железа, указанный выше учет кулоновской неидеальности сочетался с ограничением связанных состояний многократно ионизованных ионов железа на среднем расстоянии между тяжелыми частицами. Результаты расчета, представленные на рис. 5.14.

Рис. 5.15 демонстрирует удовлетворительное согласие с экспериментальными данными различных авторов. Следует подчеркнуть, что в терминах химической модели совокупность описываемых состояний плазмы железа занимает диапазон от сильно- до слабонеидеальной плазмы с переменной степенью ионизации, вырождения электронов и заметным диапазоном температур. Это иллюстрируется в Таблице 5.3, где представлена последовательность значений некоторых термодинамических параметров и безразмерных критериев, реализуемая в рассматриваемом интервале адиабаты Гюгонио.

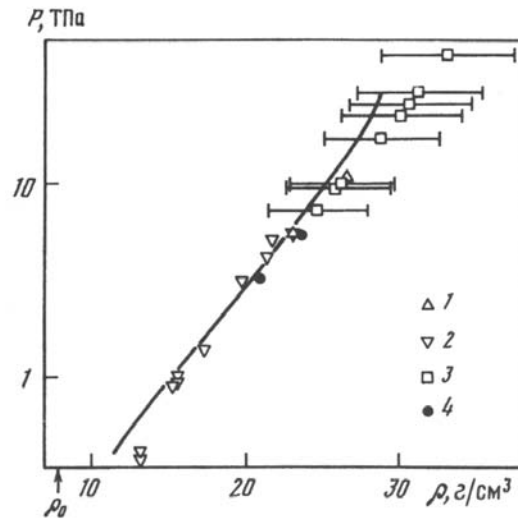


Рис. 5.14: Динамическая сжимаемость плазмы железа [203]: 1 - [7], 2 - [138], 3 - [7]. Сплошная линия - результаты расчета 5.2.1

p , ГПа	T , 10^3 K	H , кДж/г	S , Дж/г K	a , км/с	$\alpha \equiv n_e / (\sum n_i)$	Γ	$n_e \lambda_e^3$
10^3	37	89.2	2.480	13.1	1.7	48	21
$3 \cdot 10^3$	109	258	3.687	17.4	2.8	11	6.9
10^4	350	828	4.887	28	4.3	3.0	2.3
$5 \cdot 10^4$	1440	4028	7.311	55.8	6.7	0.6	0.5

Таблица 5.3: Термодинамические характеристики экстремально сжатой плазмы железа ($\rho_0 = 8.88 \text{ г/см}^3$, $m = 1$), рассчитанные с использованием модифицированного варианта псевдопотенциальной модели 5.2.1. Обозначения: p, ρ, H, S - давление, температура, удельная энтальпия и энтропия, a - скорость звука, α - суммарная степень ионизации плазмы железа, Γ - параметр неидеальности, λ_e - тепловая длина волны де-Бройля (рис.из [203])

Удовлетворительное описание сплошных ударных адиабат металлов при помощи Химической модели может быть

достигнуто не только в области сверхвысоких нагревов и сжатий, как это происходит в описанном выше случае алюминия. Расчеты, проведенные для случая сплошной ударной адиабаты никеля, при тех же предположениях, что использовались для описания его высокопористых ударных адиабат (5.19), показал удовлетворительное согласие [201] с результатами многочисленных измерений. Делая такой вывод, следует учесть, что обсуждаемые расчеты для никеля проводились без использования подгонки соответствующих радиусов (5.29) атома и ионов никеля.

5.2.6 Термодинамика экстремально сжатого водорода и дейтерия

Теплофизические свойства плотного водорода - традиционный объект интереса в теоретической и экспериментальной физике. Помимо непреходящего прикладного значения в астрофизике, теплофизика водорода исключительно важна в космических применениях и в перспективных энергоустройствах [60], [32]. Помимо этого теплофизика водорода (дейтерия, трития) играет важную методическую роль полигона для проверки достоинств и недостатков теоретических моделей. Две взаимосвязанные проблемы - металлизация с ростом плотности и свойства гипотетического "плазменного фазового перехода" (ПФП) - традиционно лидируют в качестве объектов экспериментальных и теоретических исследований. Сегодня существует большое количество работ, посвященных проблеме водорода. Особую роль среди них занимают исходящие из первых принципов подходы, претендующие на роль "численного эксперимента".

Проблема теплофизических свойств плотного водорода далека от разрешения. Более того, сегодня отчетливо оформилось противоречие двух внутренне-коррелирующихся групп экспериментальных и теоретических данных, существенно различающихся в пресказываемых ими свойствах водорода. Это оправдывает дальнейшие усилия в поисках решения проблемы водорода. В данной работе одна из версий так называемое "химической модели плазмы", развиваемая авторами с 70-х годов [32], [58], модифицирована для описания термодинамики сжатого водорода (дейтерия) как сильно-неидеальной смеси атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов ($H_2, H, H^+, H^-, H_2^+, H_3^+, e^-$). Вклад короткодействующего отталкивания молекул, атомов и др. описывается феноменологически в рамках приближения мягких сфер [291], обобщенного на случай многокомпонентной смеси [75]. Вклад кулоновской неидеальности описывается в рамках модификации предложенного ранее варианта псевдопотенциального подхода [63](5.2.1). Центральным моментом этой модели является явный учет "некулоновости" взаимодействия свободных зарядов на близких расстояниях, приводящей в условиях сильной неидеальности к заметному положи-

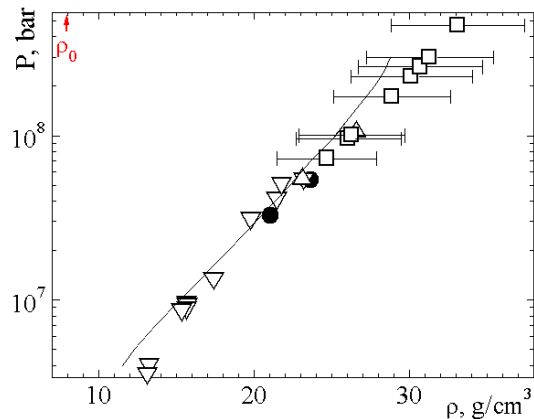


Рис. 5.15: Экстраполяция модели [63] в область экстремально сжатой плазмы. Ударная адиабата плазмы железа ($m = 1$) [203]. Экстраполяция химической модели [203]. Обозначения - как на рис. 5.14, стрелка - нормальная плотность железа).

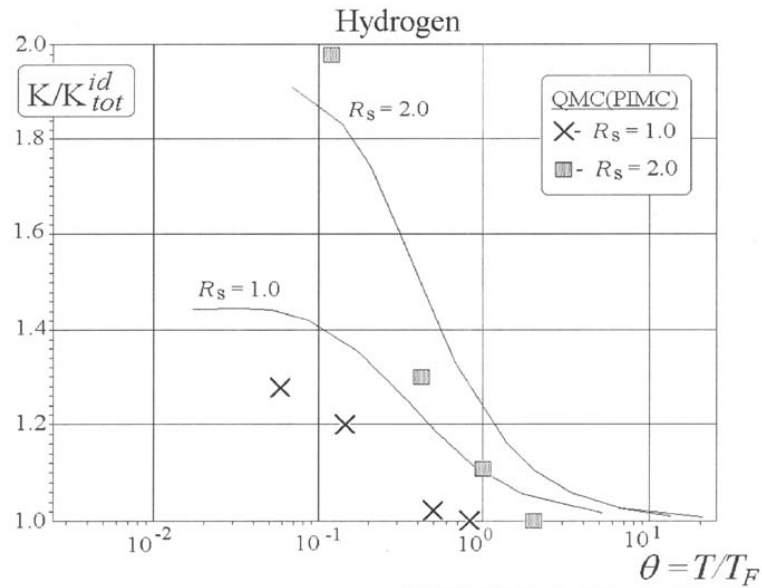


Рис. 5.16: Отклонение средней кинетической энергии, K , плазмы водорода, отнесенной к идеальнo-газовой величине, K^{id} , вдоль изохор $\rho = 0.337\text{г/см}^3$ ($r_s = 2$) и $\rho = 2.69\text{г/см}^3$ ($r_s = 1$). Сравнение результатов расчета с использованием модифицированной псевдопотенциальной модели [63](5.2.1) с результатами расчета методом квантового Монте-Карло (метод "интегралов по траекториям" (PIMC) [259]) Сплошные линии - расчет по модели [63] (система $p^+ + e^-$), \times , \square - результаты численного моделирования [259]

тельному сдвигу не только потенциальной, но и средней кинетической энергии свободных зарядов. Это представлено на рис. 5.16.

Отличительной особенностью водорода является существование обширной "мономолекулярной" области ($\rho \leq 0.3 \text{ г/см}^3$, $\mu_H \geq -D_{H_2} \approx -4,5 \text{ eV}$), где термодинамика водорода почти полностью определяется взаимодействием молекул $H_2 - H_2$. В рамках используемой в данной работе модели мягких сфер [291] параметры взаимодействия $H_2 - H_2$ выбирались максимально близкими к рекомендациям строгого "неэмпирического" атом-атомного приближения [164]. При этом пренебрегалось нецентральностью взаимодействия $H_2 - H_2$. Расчеты показали, что при использовании "мягкого" отталкивания $V(r) \sim 1/r^6$ могут быть вполне удовлетворительно описаны как молекулярная часть изотермы $T = 0$ ("холодная кривая"), так и значительная часть ударно-волновых экспериментов, а кроме того также и результаты точных расчетов термодинамики смеси ($H_2 + H$) методом Монте-Карло [164].

Главной проблемой химической модели при описании неидеальности, включая случай плотного водорода, является проблема корректного определения совокупности эффективных потенциалов взаимодействия между всеми участниками смеси. Это относится как к взаимодействиям с участием заряженных частиц, так и нейтральных, и прежде всего пар $H_2 - H$ и $H - H$. Существенно, что фигурирующее в химической модели эффективное взаимодействие свободных атомов радикально отличается от даваемых строгой теорией синглетной (притягивательной) и триплетной (отталкивательной) ветвей полного потенциала взаимодействия $H - H$, поскольку вклад пар $H - H$, взаимодействующих по синглетной ветви, уже учтен в разряде внутримолекулярного движения.

Сказанное еще более справедливо в отношении эффективного взаимодействия с участием (свободных) заряженных частиц. Известно, что в химической модели вклады свободных и связанных состояний должны быть взаимосогласованы. На сегодня существует серьезное противоречие в даваемых различными подходами рекомендациях вида и параметров этих эффективных потенциалов. При этом вне мономолекулярной области главным объектом противоречивых рекомендаций являются параметры короткодействующего отталкивания $H - H$ и $H - H_2$. Примечательно, что согласно настоящим расчетам не менее важным являются параметры эффективных потенциалов взаимодействия $H_2 - A^\pm$, где A^\pm - все заряженные компоненты. Один из вариантов - рекомендации неэмпирического атом-атомного приближения [164], приводящие к относительно большим "собственным объемам" атома водорода (дейтерия). В терминах используемой модификации модели мягких сфер рекомендации [164] близко соответствуют приближению "аддитивных объемов": $(R_{H_2})^3 \approx 2(R_H)^3$ (R_H и R_{H_2} - эффективные радиусы атома и молекулы). Такой выбор приводит при $\rho \leq \rho^* \sim 0.3$ г/см³ к результатам, хорошо совпадающим при $T \leq 10000$ К с точными расчетами методом Монте-Карло [164], а при $T \leq 10$ кК и с не-аномальной частью результатов квантового Монте-Карло (PIMC [256]). При этих же температурах результаты также удовлетворительно согласуются и с остальными вариантами первопринципных подходов: квантовой молекулярной динамики (QMD [183]) и метода "волновых пакетов" (WPMD [227]). Следует подчеркнуть, что вся эта совокупность теорий решительно не способна воспроизвести известный провал в положении ударной адиабаты дейтерия в области давлений $p \sim 0.5 \div 2$ Мбар (см.рис. 5.17) в сторону неожиданно высоких степеней сжатия ($\sigma_{\max} \equiv \rho_{\max}/\rho_0 \sim 6,5$ против ожидаемого $\sigma_{\max} \sim 4$), а также и не содержит аномалий типа фазовых переходов при $\rho \geq 1$ г/см³.

На рис. 5.17 результаты "первопринципных" подходов: - данные метода квантового Монте-Карло (PIMC [243]) и молекулярной динамики (ТВМД [183], [227]). Расчеты в химической модели представлены высокотемпературной плазменной (E^* - PАТСН) и низкотемпературной атомно-молекулярной (E^{**} - ВЕФ) моделями Эбелинга с сотрудниками [192], [172], а также моделью настоящей работы [75] (код SAHA-IV) с двумя вариантами атом-атомного потенциала: (а) - согласно рекомендациям неэм-

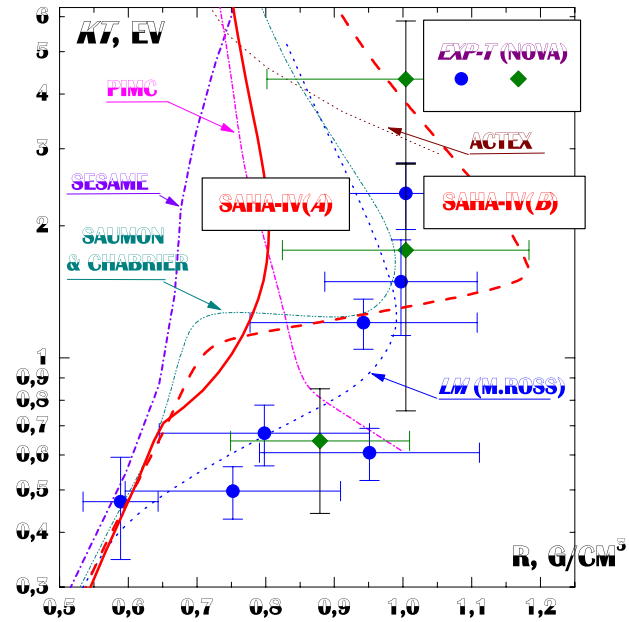


Рис. 5.17: Ударная адиабата дейтерия. Экспериментальные данные (•, ◊ - лазер "NOVA" [184] [179]) дополнены новыми данными (× - Sandia-LANL [276]). Данные расчета представлены УРС библиотеки SESAME (Kerley-1971 [226]), интерполяционной моделью М.Росса - LM(ROSS) [261], [262]).

пирического атом-атомного приближения [164], (b) - согласно рекомендациям Ree, Ross, Young [263] (штриховая линия).

Совершенно иначе выглядит термодинамика сжатого водорода (дейтерия) если для описания взаимодействий $H - H$ ($D - D$) воспользоваться широко принятым в приближенных расчетах потенциалом, рекомендованным Ree, Ross & Young [263], и при этом для взаимодействия $H - H_2$ воспользоваться стандартными правилами комбинирования. В терминах модификации модели мягких сфер, принятой в данной работе, это соответствует существенно меньшему отношению "собственных" объемов H и H_2 ($R_H/R_{H_2} \approx 0.4 \Rightarrow 2(R_H)^3/(R_{H_2})^3 \approx 0.13$). Такой выбор "собственного" размера атома немедленно приводит при $\rho \geq 0.3 \text{ mole/cm}^3$ к бурной "диссоциации давлением", сопровождаемой обширным провалом в ударной адиабате дейтерия (см.рис. 5.17), а кроме того и к появлению фазового перехода флюид-флюид с параметрами достаточно близкими к параметрам большого количества "плазменных фазовых переходов" (ПФП), предсказанных к настоящему времени в многочисленных посвященных этой проблеме теоретических работах.

Обсуждаемая противоречивая ситуация далека от своего разрешения. Данные эксперимента с отраженной ударной волной в плазме дейтерия (Мостович - Naval Lab. [246]) подтверждают зафиксированную ранее аномалию в УРС дейтерия в прямой ударной волне (лазер "NOVA" [184], [179]). Вместе с тем данные по измерению УРС дейтерия в экспериментах с ударным сжатием дейтерия пластиной, разогнанной до скоростей $\sim 20 \text{ km/s}$ при помощи ускорения магнитным полем (Sandia Lab + LANL [276]) не подтверждают существования каких бы-то ни было аномалий в УРС дейтерия в обсуждаемом диапазоне параметров при давлениях вплоть до $p \leq 70 \text{ GPa}$. Сложившаяся ситуация иллюстрируется на рис. 5.17 и 5.18, где представлены лишь небольшая часть теоретических приближений, предложенных для описания УРС плотного водорода (дейтерия).

На фоне оживленной дискуссии, разгоревшейся вокруг проблемы уравнения состояния плотного водорода (дейтерия) кажутся незаслуженно забытыми проведен-

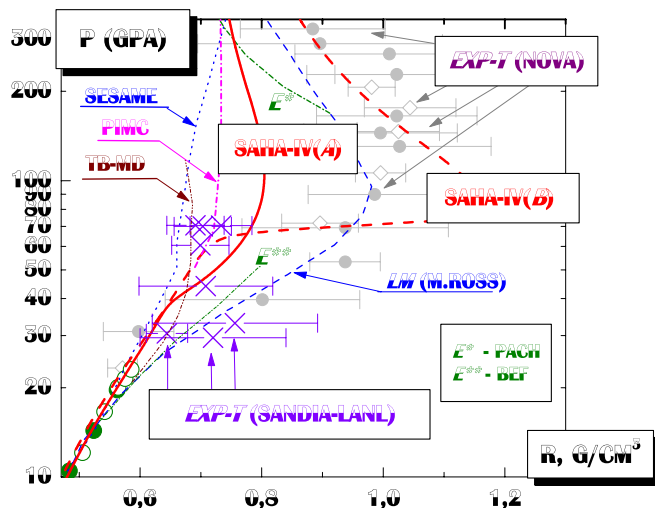


Рис. 5.18: Температура ударно-сжатой плазмы дейтерия. Экспериментальные данные (лазер "NOVA" - 2001) [249] в сравнении с теорией. Представлены: - УРС библиотеки SESAME (Kerley-1971) [226], интерполяционное УРС М.Росса - LM(Ross) [262], разложение по степеням активности Ф.Роджерса (АСТЕХ) [265], [267]. Метод квантового Монте-Карло (PIMC) [243]. Химическая модель [274] и [75] (код SAHA-IV) с двумя вариантами атом-атомного потенциала: (a) - согласно неэмпирическому атом-атомному приближению [164] (сплошная линия), (b) - согласно рекомендациям [263] (штриховая линия).

ные в 60-х годах во ВНИИЭФ (Саров) эксперименты по квазиизэнтропическому сжатию водорода мощными ударными волнами [27] (см. также [128]). Ввиду квазиизэнтропичности сжатия в экспериментах ВНИИЭФ достигались относительно более низкие температуры при том же уровне давлений, что и в ударных экспериментах последних лет.

Примечательно, что в экспериментах ВНИИЭФ была зафиксирована аномалия в УРС водорода в диапазоне плотностей $\rho \sim 1$ г/см³ ($V \sim 1$ см³/моль) и давлений $p \sim 3$ Мбар (300 ГПа), что по оценкам авторов соответствует температурам $T \sim 3000$ К. Аномалия имела вид относительно слабого, но вполне четкого разрыва в плотности на изэнтропе ($\Delta\rho \sim 10\%$). Авторы эксперимента [27] интерпретировали эту аномалию, как свидетельство перехода диэлектрик-металл в плотном водороде. В сегодняшней интерпретации эта аномалия соответствует диссоциации давлением и дает аргументы авторам этой интерпретации [90] чтобы предсказывать существование в твердом водороде гипотетического диссоциативного фазового перехода, разделяющего молекулярную и атомарную фазы (см. рис. 4.6). В свое время эта проблема обсуждалась Копышевым и Хрустальевым [89].

5.3 ХМП как широкодиапазонное уравнение состояния

Одним из центральных вопросов теории неидеальной плазмы, и более широко - уравнения состояния вещества экстремальных параметров - является соотношение строгого описания, даваемого физической моделью, рассматривающей вещество как сильно взаимодействующую совокупность ядер и электронов, и более простую и интуитивно понятную химическую модель, оперирующую понятиями составных эффективно связанных частиц переменного состава. Заметим, что большинство из хорошо разработанных ячеечных приближений, традиционно используемых для описания экстремальных состояний вещества (см. обзоры [84], [3], [22], а также работы [230], [170], [80], [117], [273], [58], [157], [229] и др.), строго говоря, не являются физической моделью, несмотря на явное использование лишь ядер и электронов. Указанный подход является, по сути, описанием одной-единственной средней "атомной" ячейки, результаты расчета которой затем более или менее произвольно дополняются вкладом ядерных степеней свободы в каком-либо из автономных приближений, будь то приближение идеального газа [80] или приближение твердых сфер [118], или же приближение, опирающееся на результаты для модели однокомпонентной плазмы [87].

При всей привлекательности и практическом удобстве такого подхода в нем исходно отсутствует важнейший элемент - самосогласованное "обратное" влияние межъядерных корреляций на равновесное распределение электронов внутри ячейки [64], [65]. Именно это является главным каналом влияния межъядерных корреляций на суммарные термодинамические функции системы. Этот факт хорошо известен в химической модели плазмы [32], где основным эффектом неидеальности в суммарных термодинамических функциях, особенно в калорическом уравнении состояния, является не прямой эффект включения соответствующих поправок в УРС, а косвенный - за счет вызываемого неидеальностью сдвига ионизационного (и химического) равновесия.

Будучи строгой, физическая модель не использует никакой эмпирической Индивидуальной информации о веществе кроме его заряда ядра Z . Химическая модель,

напротив, широко использует подобную информацию в виде потенциалов ионизации, теплот химических реакций, а также спектра изолированных возбужденных состояний составных частиц - атомов, ионов, молекул и т.д. Этого достаточно для описания разреженного "газового" состояния вещества. Описанный выше подход к экстраполяции химической модели на более плотные состояния, делает следующий шаг, добавляя к числу используемых эмпирических характеристик вещества величину нормальной плотности и энергии связи конденсированного вещества. Логическим продолжением этого процесса является дальнейшее расширение круга используемых эмпирических характеристик конденсированного состояния вещества, включая его дифференциальные характеристики, как коэффициент Грюнайзена, сжимаемость, теплоемкость и т.д.

Наконец, завершением этого процесса было бы придание участвующим в теории Величинам собственных объемов атомов, ионов и молекул характера свободных параметров, выбираемых из условия наилучшего описания таких фундаментальных характеристик конденсированного состояния, как "холодная кривая" (изотерма $T = 0$) или ударная адиабата сплошного вещества. В этой связи следует подчеркнуть принципиальную важность использованного в §7 монотонного убывания радиусов ионов с ростом кратности их ионизации. В сочетании с использованной моделью твердых сфер такое соотношение радиусов качественно меняет вид холодной кривой вещества и его сплошной ударной адиабаты, так как в отличие от обычного "однокомпонентного" УРС Ван дер Ваальса делает допустимой любую степень сжатия вещества, что в сочетании с включением в расчет возможности многократной ионизации приводит к появлению в теории одного из важнейших механизмов - так называемой ионизации давлением.

В работе [34] величины радиусов старших ионов меди $Cu^{+2} - Cu^{+7}$ были для простоты приняты одинаковыми, что привело к достаточно хорошему, учитывая реальную точность измерений [55], совпадению с уникальными данными экспериментов [55], проведенных в условиях подземного ядерного взрыва и позволивших достичь ультравысоких давлений $\sim 10 - 20$ Мбар при пористости $m = 3$ и 4. Согласно обсуждаемым расчетам в химической модели это соответствует температурам $\sim 2 - 3 \cdot 10^5$ К и кратностям ионизации $N_e/(N_i + N_o) \leq 5$.

Сегодня, рассматривая более широкий диапазон температур и давлений, нетрудно установить, что одно лишь изменение радиусов атома и ионов меди (без изменения формы остальных поправок на неидеальность), дает возможность удовлетворительно описать параметры экспериментально измеренных ударных адиабат [55] с $m = 3$ и 4. Это может быть достигнуто при следующем сочетании радиусов (а.е.): - $r_c(Cu) = 2.0$, $r_c(Cu^{+1} - Cu^{+3}) = 1.75$. Естественно, что такое совпадение не является физическим объяснением такого сочетания размеров. Более того, подобное использование радиусов как свободных параметров позволяет добиться хорошего согласия с данными эксперимента [55], но одновременно нарушают описание данных другого эксперимента [137]. Подчеркнем, что никакое сочетание радиусов в рамках описываемой модели не позволяет одновременно описать данные экспериментов [55], [137].

Вопрос об оптимальном сочетании радиусов, соответствующих использованию в описанной выше модели более корректных форм поправок на неидеальность, в настоящее время остается открытым, как и вопрос о необходимых дополнительных экспериментах, способных провести "селекцию" лучших приближений среди тех, что

оказались эквивалентными в описании экспериментальных данных по калорическому УРС (ударных адиабат и изэнтроп разгрузки). Напомним еще раз, что такое параллельное сосуществование возможно в силу принципиальной неполноты усеченного калорического УРС - $U(p, V)$.

Указанная селекция тем более целесообразна, что использование химической модели плазмы, как составной части некоего единого интерполяционного уравнения состояния, является на сегодня достаточно освоенным приемом [81], [265]. В работе [81] предложена так называемое "квазизонная интерполяция" (КЗИ) между химической моделью, развитой для разреженной слабонеидеальной плазмы, и квантово-статистической моделью [80], развитой для условий экстремального сжатия вещества. Интерполяция [81] не является простым смешением двух опорных моделей, а опирается на физически правдоподобные представления о постепенном уширении дискретных уровней в квазизоны по мере роста степени сжатия плазмы.

Также экстраполяционной моделью, связанной с модернизацией и далекой экстраполяцией разложения по степеням активности [266], является модель АСТЕХ [265]. Детальное сравнение постепенно выделяющихся в самостоятельную группу интерполяционных уравнений состояния, а также традиционных широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния (см. [17]) в настоящее время еще не проведено и несомненно представляет большой интерес.

Обсуждаемая трансформация химической модели в широкодиапазонное уравнение состояния сближает его с фактическим итогом встречной эволюции изначально полуэмпирического по идеологии широкодиапазонного уравнения состояния [88], [110]. Эта модель развивает концепцию В.П. Копышева о зависимом от давления эффективном собственном объеме ("ковольюме") [88] и дополнена расчетом термической ионизации "по САХА" [110].

Можно предположить, что закономерным итогом этой эволюции будет дополнение УРС [110] учетом кулоновских поправок и, возможно, переменности статистических сумм ионов в зависимости от давления (плотности). Еще раз отметим, что имеющиеся экспериментальные данные по ударному сжатию рассмотренных веществ нуждаются в дополнении температурной (энтропийной) информацией о достигнутых в ударном эксперименте состояниях для селекции среди многочисленных теоретических подходов, используемых для описания термодинамических свойств плотной

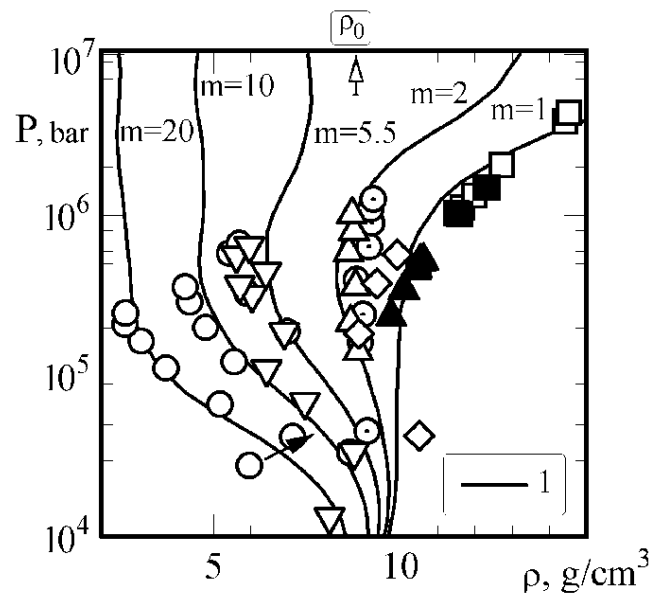


Рис. 5.19: Экстраполяционные свойства модифицированного квазихимического подхода (код "САХА-IV") в сравнении с экспериментальными данными по ударному сжатию сплошного и пористого никеля, $m \equiv \rho_0/\rho_{00}$ - пористость сжимаемых образцов никеля, стрелка - нормальная плотность металлического никеля [201].

неидеальной плазмы, создаваемой мощными ударными волнами [17]. В заключение отметим, что химическая модель плазмы - один из двух основных альтернативных, исходящих из микроскопических представлений, подходов, традиционно применяемых (помимо полуфеноменологических уравнений состояния) для теоретического описания термодинамических свойств ударно-сжатой плазмы. (химическая модель разреженной плазмы - ячеечная модель конденсированного вещества).

Основной тенденцией последних десятилетий является своеобразное взаимопроникновение - встречная экстраполяция каждого из подходов в направлении пограничной, наиболее сложной для теоретического описания, области параметров, а также построение своего рода "интерполяционных мостов" с постепенным приданием химической модели характерных черт так называемое широкодиапазонного уравнения состояния - объекта, существовавшего до сих пор как разновидность многочисленных полуэмпирических уравнений состояния. Сравнение экспериментальных и расчетных (в рамках химической модели) данных по параметрам ударного сжатия вещества позволяют заключить, что основной качественный результат по всем результатам ударно-волнового эксперимента в области расширенного вещества ("газовой" плазмы и пористых ударных адиабат) - наличие неучтенных традиционными вариантами химической модели эффектов, эквивалентных на языке калорического уравнения состояния дополнительным механизмам эффективного межчастичного отталкивания. Основной эффект, учет которого позволяет радикально улучшить экстраполяционные свойства химической модели плазмы в плане описания результатов ударно-волнового эксперимента в области плотной и сверхплотной плазмы (рис. 5.19). Важным свойством описания, получаемого с использованием модернизированной Химической модели, является наличие в модели полного и термодинамически согласованного описания помимо калорического, также и термического (энтропийного) уравнения состояния, а также информации о самых общих структурных (состав) характеристиках состояния. Правильность этих элементов модельного описания требует проведения дополнительных экспериментальных измерений вне рамок традиционной фиксации только кинематических характеристик ударного сжатия и изэнтропического расширения ("разгрузки").

Глава 6

Термодинамическая устойчивость и фазовые переходы

6.1 Общие условия термодинамической устойчивости

Известно, что совокупность термодинамических свойств любой равновесной системы полностью задана, если задан термодинамический потенциал системы (ТП), как функция своих естественных переменных [98], [73]. Соответственно, условия устойчивости термодинамического равновесия (УТР) могут быть выражены как условия, наложенные на зависимость этого потенциала от его переменных. При этом существенно, что объектом расширенного термодинамического описания помимо полностью термодинамически равновесных состояний служит также совокупность состояний равновесных частично, в сравнении с которыми состояние полного термодинамического равновесия обладает тем или иным свойством экстремальности соответствующего термодинамического потенциала. В основе условий УТР лежит представление о наличии у термодинамически равновесной системы внутренних степеней свободы, например способности принимать однородный или неоднородный характер распределения в объеме, и способности системы распоряжаться этими степенями свободы в стремлении достичь минимума соответствующего термодинамического потенциала при соблюдении внешних ограничений экстенсивных переменных (например, V или \mathbf{N}) или же фиксированного значения интенсивных переменных (например, p или T) постоянство которых поддерживается внешними условиями (термостатом).

Наиболее общей формой УТР [10], [94] является условие максимальности энтропии изолированной системы в состоянии полного термодинамического равновесия по сравнению с любым частично равновесным состоянием (для которого определена энтропия). Это эквивалентно свойству выпуклости энтропии как функции всех своих экстенсивных переменных, $S(V, U, \mathbf{N})$ [$\mathbf{N} \equiv \{N_i\}$]. Следствием этого свойства являются свойства экстремальности каждого из термодинамических потенциалов в состоянии полного термодинамического равновесия.

Условия УТР имеют наглядную геометрическую интерпретацию в виде условий выпуклости или вогнутости каждого из термодинамических потенциалов, как функции своих естественных переменных (см. ниже). Форма и смысл утверждений о соблюдении или нарушении УТР имеют существенно разный смысл в зависимости от того, рассматривается ли зависимость от интенсивной (T, p, μ), или экстенсивной

(V, \mathbf{N}, S) , термодинамической переменной.

6.1.1 Условия термодинамической устойчивости

Принято различать условия УТР в дифференциальной форме, в виде утверждений о локальных свойствах термодинамических потенциалов ("в малом"), или в интегральной форме, в виде утверждений о глобальных свойствах этих потенциалов ("в целом"). Условия УТР в локальной форме следуют из условий УТР в целом, но не наоборот. Термодинамическое состояние, удовлетворяющее локальным условиям УТР, но не удовлетворяющее условиям УТР в целом, является метастабильным (например, перегретая жидкость или переохлажденный пар в переходе газ - жидкость). Соотношение условий УТР в локальной и интегральной формах особенно важно для термодинамики НТП, так как в заметной части гипотетических "плазменных" фазовых переходах, ПФП (см. ниже), при низких температурах существует область параметров, где на изотермах присутствуют три ветви (участка), имеющих черты метастабильного термодинамического равновесия $(\partial p / \partial V)_T \leq 0$, а не две, как это имеет место для обычного перехода газ - жидкость в модели Ван дер Ваальса.

6.1.2 Дифференциальная форма условий ТУ

Справедлива для бесконечно малых отклонений интенсивной переменной - x и экстенсивной переменной - X . В случае дифференцируемости ТП локальная форма условий УТР выражается в виде набора условий на вторые производные ТП. В частности, традиционные неравенства для повторных производных свободной энергии $F(V, T, \mathbf{N})$:

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial T^2} \right)_{V, \mathbf{N}} \sim C_V \geq 0, \quad (6.1)$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial V^2} \right)_{T, \mathbf{N}} \sim - \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T, \mathbf{N}} \geq 0, \quad (6.2)$$

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \mathbf{N}^2} \right)_{V, T} \sim \left(\frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{N}} \right)_{V, T} \geq 0. \quad (6.3)$$

Если система однородна, ее термодинамическое описание полностью задается удельным термодинамическим потенциалом, как функцией двух переменных. Например, $F(V, T, \mathbf{N}) \equiv V f(T, \mathbf{n})$. В этом случае условия (6.2) и (6.3) являются частными случаями единого неравенства (6.4).

$$\left(\frac{\partial^2 f(\mathbf{n}, T)}{\partial \mathbf{n}^2} \right)_T \equiv \left(\frac{\partial \mu(\mathbf{n}, T)}{\partial \mathbf{n}} \right)_T \geq 0. \quad (6.4)$$

Нарушение условий ТР в локальной форме означает абсолютную термодинамическую неустойчивость системы. Кривая, являющаяся геометрическим местом точек нарушения условий (6.2)-(6.3), но не (6.1) (см. ниже), называется "спинодаль" и представляет собой термодинамическую границу метастабильных состояний одной из сосуществующих фаз, например, переохлажденного пара или перегретой жидкости в случае равновесия газ - жидкость. Термодинамическая граница - спинодаль - может

быть реально недостижима на практике из-за развития кинетической неустойчивости (см. [130]).

Обстоятельство важное в отношении характерных для плазмы поисков гипотетического "плазменного фазового перехода" (ПФП) (см. ниже) заключается в том, что информация о положении и свойствах спинодаль в некоторых случаях черпается из того или иного модельного приближения, применимого для описания только одной из фаз (например, слабонеидеальной). В то же время реальная граница сосуществования фаз, бинодаль, обоюдным образом зависит от свойств обеих фаз, и в общем случае не может быть получена из приближения, применимого для описания только одной из фаз плазмы.

6.1.3 Интегральная форма условий ТУ

Относится к термодинамическому потенциалу в целом и справедлива для конечных отклонений переменных x или X . Она выражается в виде интегрального условия, геометрический смысл которого состоит в том, что хорда, соединяющая любые две точки, отвечающие на поверхности термодинамического потенциала двум состояниям термодинамически устойчивой системы, (включая частично-равновесные состояния, например, метастабильные), в состоянии полного термодинамического равновесия всегда лежит по одну сторону от изображающей эту зависимость поверхности.

6.1.4 Ограничения на термодинамические зависимости

Общей форме условий УТР в виде утверждений о свойствах $S(V, U, N)$ соответствует набор утверждений о свойствах каждого из термодинамических потенциалов. Прежде всего, это внутренняя энергия $U(V, S, N)$, свободная энергия Гельмгольца $F(V, T, N)$, свободная энергия Гиббса $G(P, T, N)$ и большой термодинамический потенциал $\Omega(V, T, \mu)$.

Наиболее наглядной формой УТР является условие вогнутости внутренней энергии $U(V, S, N)$ как функции всех своих экстенсивных переменных. В состояниях, где $U(V, S, N)$ дифференцируема, это эквивалентно неравенствам, наложенным на совокупность вторых производных функции $U(V, S, N)$. Это, прежде всего, относится к повторным производным:

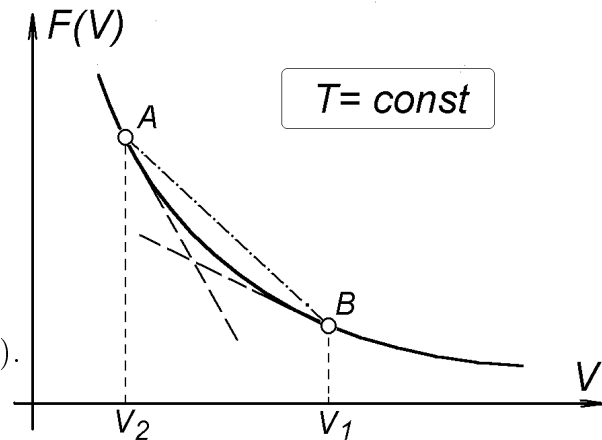


Рис. 6.1: Схематическая зависимость свободной энергии $F(X)$ от экстенсивной переменной (удельного объема, $X \equiv V$), сплошная линия - $F(V)$, штриховые линии - касательные в точках A и B (давление), штрих-пунктир - хорда AB (свободная энергия аддитивной смеси подсистем A и B)

Это, прежде всего, относится к повторным производным:

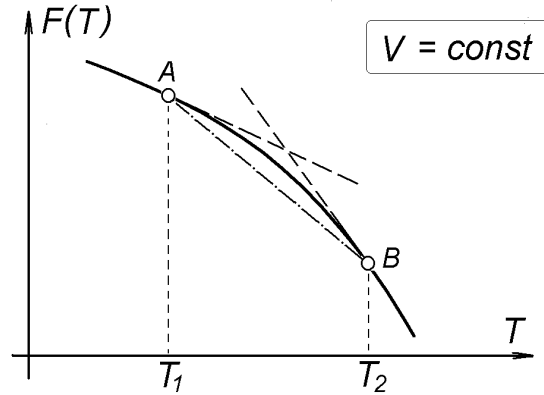


Рис. 6.2: Схематическая зависимость свободной энергии $F(x)$ от интенсивной переменной температуры, $x \equiv T$. сплошная линия - $F(T)$, штриховые линии - касательные в точках А и В (энтропия), штрих-пунктир - хорда АВ.

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial S^2}\right)_{V, \mathbf{N}} \equiv \frac{T}{C_V} \geq 0, \quad (6.5)$$

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right)_{S, \mathbf{N}} \equiv -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{S, \mathbf{N}} \geq 0, \quad (6.6)$$

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{N}^2}\right)_{V, T} \sim \left(\frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{N}}\right)_{V, S} \geq 0. \quad (6.7)$$

Условие (6.7) имеет форму условия положительной определенности матрицы $\|\partial \mu / \partial \mathbf{N}\|$, включающего, в частности, положительность производных $(\partial \mu_i / \partial N_j)_{S, V, N_{(j \neq i)}}$.

Помимо (6.5)(6.7), условие вогнутости функции $U(V, S, \mathbf{N})$ эквивалентно знакопостоянству дополнительных соотношений между производными (6.5)-(6.7) при фиксированных экс- и интенсивных переменных:

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}\right)_{Y, Z} \geq \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}\right)_{y, z} \geq \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2}\right)_{y, z} \geq 0. \quad (6.8)$$

$$C_P \geq C_V \geq 0, \quad (6.9)$$

$$-\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{S, \mathbf{N}} \geq -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T, \mathbf{N}} \geq -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T, \mu} \geq 0, \quad (6.10)$$

$$\left(\frac{\partial \mu}{\partial \mathbf{N}}\right)_{V, S} \geq -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{P, S} \geq -\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{P, T} \geq 0. \quad (6.11)$$

Универсальной формой условий устойчивости термодинамического равновесия (УТР) являются два утверждения:

А) Любой ТП описывается вогнутой функцией своих экстенсивных естественных переменных (например, $U(V)_{S, \mathbf{N}=\text{const}}$ или $U(S)_{V, \mathbf{N}=\text{const}}$ или $F(V, \mathbf{N})_{T=\text{const}}$ и др.).

Б) Любой ТП описывается выпуклой функцией своих интенсивных естественных переменных (например, $F(T)_{V, \mathbf{N}=\text{const}}$ или $G(P, T)_{\mathbf{N}=\text{const}}$ и др.). Обсуждаемые

свойства ТП геометрически эквивалентны тому, что любая хорда, соединяющая две точки, отвечающие на поверхности ТП двум однородным состояниям (включая т.наз. "двойную касательную" в известных построениях изотермы ТП в двухфазной области (см.рис. 4.3), лежит всегда по одну сторону от изображающей эту зависимость поверхности, а именно:

АА) Всегда выше, если рассматривается зависимость ТП от экстенсивной переменной $Y(X)$ (вогнутость)

$$Y(X_1) + \left(\frac{\partial Y}{\partial X} \right)_{X=X_1} (X - X_1) \leq Y(X), \quad (6.12)$$

например, в отношении свободной энергии, как функции удельного объема, $F(V)_{N,T=const}$

$$F(V_1) + \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{V=V_1} (V - V_1) \leq F(V). \quad (6.13)$$

АБ) Всегда ниже, если рассматривается зависимость ТП от интенсивной переменной $Y(x)$ (выпуклость)

$$Y(x_1) + \left(\frac{\partial Y}{\partial x} \right)_{x=x_1} (x - x_1) \leq Y(x), \quad (6.14)$$

например, в отношении свободной энергии, как функции температуры, $F(T)_{V,N=const}$

$$F(T_1) + \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{T=T_1} (T - T_1) \leq F(T), \quad (6.15)$$

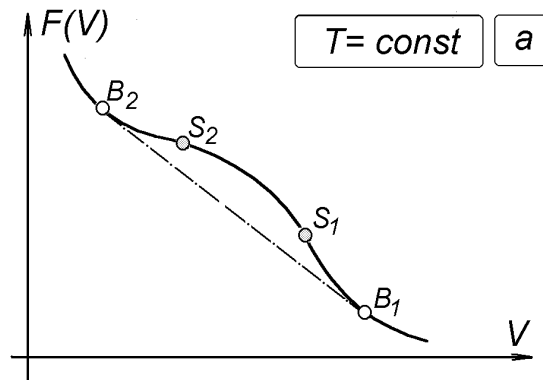


Рис. 6.3: Схематический вид изотермы $F(V)_{T=const}$ в двухфазной области, (а) - переход газ-жидкость, B_1 и B_2 - границы двухфазной области (бинодали). S_1 и S_2 - точки перегиба кривой $F(V)_T$ - границы абсолютной термодинамической неустойчивости (спинодали), прямая $B_1 - B_2$ - равновесная изотерма в двухфазной области ("двойная касательная")

Условия УТР в форме (6.12), (6.14) применимы в общем случае, в частности и тогда, когда первые производные ТП терпят разрыв в какой-либо точке. Смысл условий (А) и (Б) существенно отличается. Это может быть пояснено на примере свободной энергии $F(V, T, N)$:

АВ) Условия УТР по отношению к зависимости $F(V, T, N)$ от экстенсивной переменной: Если функция $F(V, T, N)$ описывает совокупность однородных термодинамически равновесных состояний, то хорда, соединяющая любые две точки "1" и "2", например, $F(T, V', N')$ и $F(T, V'', N'')$, отвечает совокупности точек, описывающих состояние системы, разделенной на две подсистемы, например, на две однородные фазы разных составов, $\{n'\}$ и $\{n''\}$, в том числе разных удельных объемов, v' и v'' , при фиксированной стехиометрии и т.д.

Подчеркнем, что при фиксированных пропорциях химических элементов в полной системе ("брутто-состав") или фиксированном соотношении зарядов разных знаков (электронейтральность) она может распадаться на две или более подсистемы с пропорциями, отличными от исходной для всей системы в целом, (например, с разной стехиометрией или, вообще говоря, с отклонением от электронейтральности). Таким образом, в состоянии УТР термодинамический потенциал $f(T, n)$ однородной системы должен быть минимален по отношению к любым вариациям состава [73], δn , в том числе и с отклонением от фиксированной пропорции или же электронейтральности. В дифференциальной форме это выражается условием:

$$\left\langle \delta n \left\| \frac{\partial \mu}{\partial n} \right\| \delta n \right\rangle \geq 0. \quad (6.16)$$

АС) Условия ТУ по отношению к зависимости ТП от интенсивной переменной: В этом случае в состоянии равновесия в ансамбле, в котором постоянство данной интенсивной переменной, например, температуры T , поддерживается термостатом, вторая производная от ТП по этой переменной эквивалентна среднеквадратичной флуктуации сопряженной интенсивной переменной и потому знакопостоянна, если равновесное состояние системы существует и описывается распределением Гиббса. Фигурирующая в глобальном условии

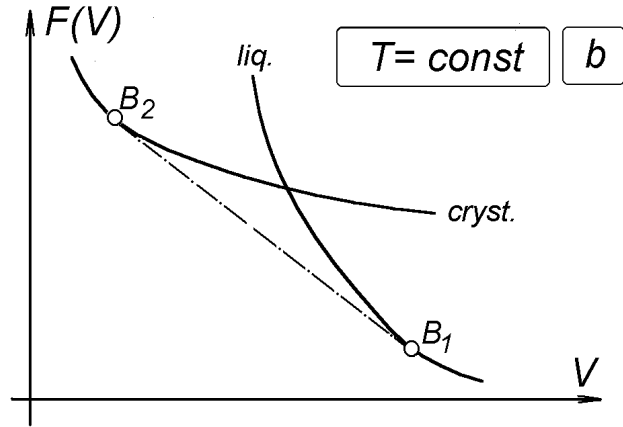


Рис. 6.4: Схематический вид изотермы $F(V)_{T=const}$ в двухфазной области, (b) - переход жидкость-кристалл.

выпуклости (Б) хорда, соединяющая какие-либо две точки на кривой, изображающей зависимость $Y(x)$, уже не является, как ранее, совокупностью точек, описывающих состояние системы, разделенной на две подсистемы, например, две однородные фазы. Следовательно, нарушение условия знакопостоянства вторых производных по интенсивным переменным (6.14) в каком-либо из модельных приближений, используемых для термодинамического описания плазмы, не является указанием на возможность фазового расслоения в системе, а означает лишь качественную некорректность используемого приближения. Сказанное существенно, в частности, при толковании возможного нарушения неравенства Гиббса-Боголюбова [220], [251] в каком-либо из приближенных описаний плазмы. Это неравенство в зависимости ТП от "константы связи", λ , {линейного включения взаимодействия в системе, $V(r|\lambda) \equiv \lambda V(r)$ }

может рассматриваться, как частный случай общих ограничений зависимости ТП от интенсивных переменных. Например, отмеченное в [32] нарушение этого условия в кольцевом (дебаевском) приближении в большом каноническом ансамбле, широко используемом для описания кулоновской неидеальности, не является признаком возможного фазового перехода в системе [193] (см.однако [211]).

6.2 Потенциал как термодинамическая переменная

6.2.1 Общие ограничения

В теории неидеальных систем очень полезным оказывается (отчасти формальное) введение какого-либо из параметров, характеризующих межчастичное взаимодействие в системе, в число полноправных термодинамических переменных. Это в особенности важно в контексте общей проблемы термодинамической устойчивости. В этом случае вся совокупность перечисленных выше правил и традиционных соотношений, выражающих условия термодинамической устойчивости, естественным образом дополняется (находит свои эквиваленты) цепочкой неравенств, соответствующих вариациям этой "дополнительной" переменной. Данная совокупность дополнительных неравенств справедлива в общем случае произвольного потенциала взаимодействия (допускающего существование устойчивого термодинамического состояния). Вместе с тем в плазме в силу дальнедействующего характера кулоновского взаимодействия появляется ряд важных особенностей, принципиально отличающих проблему термодинамической устойчивости в кулоновских системах от аналогичной ей проблемы в системах с короткодействующим потенциалом (см.ниже).

В большинстве случаев в качестве дополнительной переменной рассматривается так называемое "константа связи", λ , параметр, вариация которого соответствует обратимому "включению-выключению" взаимодействия

$$V(\lambda, r) \equiv \lambda V(r) \quad (\lambda = 0 \div 1). \quad (6.17)$$

Данная группа неравенств, называемая обычно неравенствами Гиббса-Боголюбова [77], составляет основу обсуждаемого дополнения традиционной термодинамики неидеальных систем (7.3.2). Вместе с тем это дополнение включает в себя условия устойчивости ТР термодинамического равновесия (УТР) по отношению и ко всем другим типам вариаций параметров межчастичного взаимодействия, как то: вариация масштаба, "включение" одной дополнительной частицы в систему и т.д. Известно [98], что некоторые из типов таких вариаций формально эквивалентны вариациям обычных термодинамических параметров, что связывает эти вариации с соответствующими термодинамическими переменными: линейное "включение" потенциала связано с температурой, вариация масштаба - с давлением, а "включение" дополнительной частицы - с химическим потенциалом (см.ниже).

Логическим продолжением этого процесса является включение в качестве полноправной дополнительной термодинамической переменной каждого из s -частичных потенциалов межчастичного взаимодействия в целом. Формально последовательность потенциалов $\{V_s(r_i \dots, r_j)\}$ бесконечна, но в реальных ситуациях, как правило, существенно участие лишь одно- и двухчастичного потенциалов $V_1(r)$ и $V_2(|r_i - r_j|)$. В этом случае каждый термодинамический потенциал, например свободная энергия, F , как в рамках своей зависимости от новых переменных выступает уже как

производящий функционал [14]. Соответственно, неравенства, выражающие условия термодинамической устойчивости выражаются через соответствующие вариационные производные.

Наконец, логическим завершением этого процесса и завершающей частью описанной выше (см. §4.1) "пирамидальной" структуры общего термодинамического описания неидеальной системы (см. например [72]) является включение в рассмотрение переменных термодинамически сопряженных s -частичным потенциалом взаимодействия. Общие условия выпуклости термодинамических потенциалов относительно своих естественных переменных непосредственно приводят к вариационному принципу статистической механики, составляющему фундамент всего формального описания термодинамики неидеальных систем.

6.2.2 Линейное "включение" взаимодействия

Известно, что кроме условий знакопостоянства сжимаемости, теплоемкости и т.д. (см. выше) устойчивость термодинамического равновесия системы с взаимодействием накладывает ограничения на изменения термодинамических величин при формально мыслимых вариациях потенциала взаимодействия в системе. В первую очередь это относится к зависимости статистической суммы \mathbf{Z} и соответственно свободной энергии от константы связи λ .

$$\frac{\partial^2 \text{Ln} \mathbf{Z}}{\partial \lambda^2} \geq 0 \quad \left\{ \frac{\partial^2 F(V, T, N | \lambda)}{\partial \lambda^2} \right\} \leq 0. \quad (6.18)$$

Условие (6.18) известное как неравенство Гиббса-Боголюбова [141], [220], [251], можно рассматривать как выражение свойства выпуклости логарифма статистической суммы относительно линейной вариации потенциала взаимодействия $V(\lambda, r) \equiv \lambda V(r)$ [52]. Соответственно, считая λ переменной величиной, можно выразить полный дифференциал свободной энергии, $F = -kT \text{Ln} \mathbf{Z}$, в виде:

$$dF = -SdT - pdV + \sum \mu_k dN_k + \pi d\lambda. \quad (6.19)$$

Здесь кроме обычных термодинамических величин в стандартных обозначениях введена пропорциональная средней потенциальной энергии $U_{pot}(\lambda)$ величину $\pi(\lambda)$, определяемую соотношением

$$\pi(\lambda) = \left(\frac{\partial F}{\partial \lambda} \right)_{T, V, N} = \left(\frac{\partial U}{\partial \lambda} \right)_{S, V, N} = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} \right)_{T, V, \mu} = \dots = U_{pot}(\lambda). \quad (6.20)$$

Неравенство (6.18) есть условие знакопостоянства производной $\partial \pi / \partial \lambda$. Точный смысл этого условия зависит от того, какие переменные считаются постоянными при дифференцировании. В работах [141], [251] рассматривается неравенство (6.21).

$$\left(\frac{\partial \pi}{\partial \lambda} \right)_{T, V, N} \equiv \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \lambda^2} \right)_{T, V, N} \leq 0. \quad (6.21)$$

В работе [220] фигурирует несколько отличное неравенство

$$\left(\frac{\partial \pi}{\partial \lambda} \right)_{T, V, \mu} \equiv \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2} \right)_{T, V, \mu} \leq 0. \quad (6.22)$$

Как и в ситуации с обычными термодинамическими переменными самой жесткой из неравенств типа (6.21) и (6.22) является требование знакопостоянства производной при постоянстве всех экстенсивных параметров

$$\left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_{S,V,N} \equiv \left(\frac{\partial^2 U}{\partial\lambda^2}\right)_{S,V,N} \leq 0. \quad (6.23)$$

По отношению к (6.23) остальные неравенства - (6.21), (6.22) и т.д., могут рассматриваться как следствия.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_X &= \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_x - \left(\frac{\partial\pi}{\partial X}\right)^2 \left(\frac{\partial X}{\partial x}\right)^{-1} \geq \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_x \\ 0 &\geq \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_{S,V,N} \geq \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_{T,V,N} \geq \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_{T,V,\mu}. \end{aligned} \quad (6.24)$$

Здесь использованы соотношения Максвелла и знакоопределенность производных $(\partial X/\partial x)$, где X и x обозначают экстенсивные и интенсивные переменные соответственно. Соотношения (6.24) аналогичны стандартным неравенствам

$$C_p \geq C_V \quad \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_S \leq \left(\frac{\partial p}{\partial V}\right)_T \quad \text{и т.д.}$$

Продолжая аналогично, можно известному соотношению

$$(\partial p/\partial V)_S = (C_p/C_V)(\partial p/\partial V)_T$$

поставить в соответствие следующие из (6.21)-(6.24) равенства (6.25), в которых в производных $(\partial\dots/\partial\dots)\pi$ величина λ понимается, как зависимая переменная, а π - как независимая.

$$\left[\begin{array}{c} \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_S \\ \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_T \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\pi \\ \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\lambda \end{array}\right] \quad \left[\begin{array}{c} \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_V \\ \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_p \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_\pi \\ \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_\lambda \end{array}\right] \quad \left[\begin{array}{c} \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_N \\ \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_\mu \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} \left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_\pi \\ \left(\frac{\partial\mu}{\partial T}\right)_\lambda \end{array}\right]. \quad (6.25)$$

Для средней кинетической энергии системы, $K \equiv E - U_{pot}$, можно записать неравенство (6.23) в виде

$$\left(\frac{\partial K}{\partial\lambda}\right)_{S,V,N} \equiv \lambda \left(\frac{\partial\pi}{\partial\lambda}\right)_{S,V,N} \geq 0. \quad (6.26)$$

Соотношениям (6.21)-(6.26), описывающим в дифференциальной форме ("в малом") изменение любого термодинамического потенциала A (в большинстве случаев это записывается для свободной энергии, F) при линейном включении произвольного межчастичного взаимодействия, соответствует более общая интегральная форма записи [141]

$$U_{pot}(\lambda) \equiv \lambda\pi(\lambda) \leq A(\lambda) - A(0) \leq \lambda\pi(0). \quad (6.27)$$

Правая часть неравенства (6.27) описывает эффект включения взаимодействия при "замороженных" корреляциях, соответствующих невзаимодействующей системе (т.е. $\lambda = 0$). Левая, напротив, эффект выключения взаимодействия при "замороженных"

корреляциях, соответствующих полностью включенному взаимодействию, по сравнению с величиной $\{A(\lambda) - A(0)\}$ - эффектом обратимого включения взаимодействия (при постоянных термодинамических параметрах, соответствующих данному термодинамическому потенциалу A). Следует подчеркнуть, что в соответствии с (6.26) и (6.27) включение взаимодействия при постоянных S, V и N повышает среднюю кинетическую энергию системы независимо от вида взаимодействия [59]

$$K(\lambda, S, V, N) - K(0, S, V, N) \geq 0. \quad (6.28)$$

Для систем с положительной температурой (6.28) отсюда следует неравенство Мазо [241], которое в данных обозначениях можно записать в виде

$$K(\lambda, S, V, N) - K(0, 0, V, N) \geq 0$$

Условию выпуклости свободной энергии системы $F(V, T, N|\lambda)$ как функции от константы связи λ относительно "включения" всего взаимодействия в целом (6.21)-(6.27) соответствует более общее требование выпуклости $F(\dots|\lambda)$ относительно "включения" любого дополнительного взаимодействия в системе с гамильтонианом H_0 ($H = H_0 + \lambda V$) [95], [141]

$$F \leq F_0 + \langle V \rangle_{H_0}. \quad (6.29)$$

Неравенство (6.29) является основой различных вариантов термодинамической теории возмущений (ТТВ) (см. например [169]).

С методической точки зрения очевидно, что, строя те или иные приближения для описания плазмы, мы не можем выходить за рамки приведенных выше общих ограничений. В качестве иллюстрации можно указать работу Феррела [193], где для модели электронного газа при нулевой температуре рассматривается известное приближение Гелл-Манна - Бракнера [196], справедливое в пределе высокой плотности. Нарушение в этом приближении при некоторой плотности неравенства (6.22) указывает естественную границу, экстраполяция за которую этого приближения недопустима. Вместе с тем, когда предлагаемое приближение удовлетворяет неравенству (6.21), (6.22), как например в [54], это расценивается, как довод в пользу качественной правильности такого приближения.

6.2.3 Вариация масштаба

В гамильтониан системы, находящейся в термодинамическом равновесии, как дополнительный параметр может быть введен масштаб, λ .

$$H(\lambda) = \lambda^{-2} \sum \left(\frac{p^2}{2m} \right) + \sum_{(j>i)} V_{ij}(\lambda|r_j - r_i|. \quad (6.30)$$

Изменение масштаба, то есть вариация λ , равносильна изменению объема системы, и таким образом, непосредственно связано с давлением [98]

$$\begin{aligned} -pV &= V \left(\frac{\partial E}{\partial V} \right)_{S,N,\lambda} = V \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T,N,\lambda} = \frac{\lambda}{3} \left(\frac{\partial E}{\partial \lambda} \right)_{S,N,V} = V \left(\frac{\partial F}{\partial \lambda} \right)_{T,N,V} = \dots, \\ &\dots = \frac{1}{3} \left[-2K + \left\langle \frac{\lambda \partial}{\partial \lambda} \sum_{(j>i)} \Phi(\lambda|r_j - r_i|) \right\rangle \right]. \end{aligned} \quad (6.31)$$

В отличие от предыдущего пункта теперь вариация λ является нелинейным изменением гамильтониана. По отношению к таким изменениям неравенства на вторые производные по λ , отражающие свойства устойчивости термодинамического равновесия, имеют вид [251]

$$\left(\frac{\partial^2 F}{\partial \lambda^2}\right)_{T,V,N} - \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \lambda^2} \right\rangle \leq 0. \quad (6.32)$$

Условие совместной выпуклости $F(\lambda, \dots)$ по λ и остальным интенсивным термодинамическим переменным - T, m, p или вогнутости по всем остальным экстенсивным переменным - V, N, S - приводит, как и в предыдущем пункте (6.23)-(6.24), к последовательности соотношений

$$\left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \lambda^2} \right\rangle \geq \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \lambda^2}\right)_{S,V,N} \geq \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \lambda^2}\right)_{T,V,N} \geq \left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \lambda^2}\right)_{T,V,\mu} \dots \quad (6.33)$$

Использование их для системы с гамильтонианом (6.30) с учетом (6.31) приводит к границе для сжимаемости системы. Самой жесткой является граница для изоэнтروпической сжимаемости $\gamma_S \equiv (\partial \ln p / \partial \ln \rho)_S$

$$\gamma_S \leq \frac{2}{3} + (9pV)^{-1} \left\langle \frac{\lambda^2 \partial^2 H}{\partial \lambda^2} \right\rangle = \frac{5}{3} + \frac{1}{3}(pV)^{-1} \langle x\Phi' \rangle + (9pV)^{-1} \langle x^2\Phi'' \rangle. \quad (6.34)$$

Здесь для краткости обозначено:

$$\langle x\Phi' \rangle \equiv \left\langle \frac{\lambda \partial}{\partial \lambda} \sum_{(j>i)} \Phi(\lambda|r_j - r_i|) \right\rangle \quad \langle x^2\Phi'' \rangle \equiv \left\langle \frac{\lambda^2 \partial}{\partial \lambda^2} \sum_{(j>i)} \Phi(\lambda|r_j - r_i|) \right\rangle.$$

Неравенство (6.34) переходит в равенство для идеального газа с произвольной статистикой и, что примечательно, для гипотетической системы с взаимодействием $\Theta(r) \sim r^{-2}$ [98], [280]

$$E = \frac{3}{2}(pV) \quad \left(\frac{\partial \ln p}{\partial \ln V}\right)_S = -\frac{5}{3}. \quad (6.35)$$

В заключение параграфа еще раз подчеркнем, что обсуждаемые здесь неравенства являются необходимыми, но не достаточными условиями существования термодинамического равновесия. Так (6.39)-(6.40) не зависят от того, является потенциал взаимодействия притягивающим или отталкивающим, в то время как хорошо известно, что, например, в классической системе с притяжением $\Phi(r) \sim 1/r^m$ термодинамическое равновесие не существует.

6.2.4 Ограничения для классических систем

В случае классической системы неравенства (6.21)-(6.27) могут быть усилены, поскольку распределение по импульсам и координатам независимы, и средняя кинетическая энергия K является функцией только от температуры, а безразмерная потенциальная энергия, точнее величина $\pi(\lambda, T)$, из соображений размерности зависит от λ и T только в комбинации (λ/T) : $\pi = \pi(\lambda/T)$.

В результате знакоопределенными кроме (6.21)-(6.24) становятся перекрестные производные

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \lambda}\right)_T = -\left(\frac{\partial \pi}{\partial T}\right)_\lambda \leq 0, \quad (6.36)$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \lambda}\right)_S = -\left(\frac{\partial \pi}{\partial S}\right)_\lambda \leq 0, \quad (6.37)$$

$$C_V - C_V^0 \geq 0 \quad (C_V^0 \equiv C_V|_{\lambda=0}). \quad (6.38)$$

Существенно, что, (6.36)-(6.38) не зависят от конкретного вида включаемого взаимодействия.

6.2.5 Кулоновские системы

Для системы с однородным потенциалом взаимодействия $\Phi(r) \sim r^{-m}$ (6.34) принимает вид

$$\gamma_s \leq \frac{5}{3} + \frac{1}{9}m(m-2) \left(\frac{U}{pV}\right) = \left(5 + \frac{m}{3}\right) - \frac{1}{9}2m \left(\frac{E}{pV}\right) = \frac{[10K + m(m+3)U]}{[6K + 3mU]}. \quad (6.39)$$

Для частного случая кулоновского потенциала ($m = 1$) соотношение (6.39) принимает вид:

$$\gamma_s \leq \frac{5}{3} - \frac{1}{9} \left(\frac{U}{pV}\right) = 2 - \frac{2}{9} \left(\frac{E}{pV}\right) = \frac{[10K + 4U]}{[6K + 3U]}. \quad (6.40)$$

Неравенства (6.39)-(6.40) в несколько иной форме записи получено в работе [225], минуя термодинамические аргументы. В настоящем контексте акцент сделан на прямую связь (6.39)-(6.40) с условиями термодинамического равновесия.

Классические кулоновские системы

Неравенства (6.39), (6.40) приобретают лаконичную и эффективную форму для классической системы с кулоновским взаимодействием. Известно, что в этом случае все поправки на неидеальность (в безразмерной форме) зависят от одного параметра неидеальности Γ и неравенства (6.39), (6.40) превращаются в общее ограничение наложенное на эту зависимость [59], [28], [30].

$$\frac{d \ln |U/NkT|}{d \ln \Gamma} \equiv \frac{3}{2} \left\{ \frac{d \ln |U/NkT|}{d \ln \Gamma} \right\} \geq 1. \quad (6.41)$$

$$0 \geq \left(\frac{\Delta F}{NkT}\right) \geq \frac{3}{4} \left(\frac{\Delta \mu}{kT}\right) \geq \left(\frac{\Delta U}{NkT}\right) \equiv 3 \left(\frac{\Delta p}{nkT}\right). \quad (6.42)$$

Согласно (6.41), (6.43) с ростом Γ энергия взаимодействия U , будучи отрицательной, растет не медленнее чем первая степень Γ . В пределе $\Gamma \rightarrow \infty$ эта величина растет и не быстрее чем первая степень Γ . Более существенно то, что согласно (6.41)-(6.43) поправка к давлению в классической кулоновской системе, будучи также отрицательной, должна неограниченно расти по абсолютной величине не медленнее чем $n^{4/3}$, так что положительность полного давления в такой системе может быть обеспечено только за счет эффектов вырождения по крайней мере одной из компонент

(электронов) или за счет интенсивного короткодействующего отталкивания. Это соответствует теореме Ленарда и Дайсона [44], согласно которой для термодинамической устойчивости кулоновской системы необходимо, чтобы хотя бы один из сортов зарядов подчинялся статистике Ферми.

Включение дополнительной частицы

В качестве дополнительно включаемого взаимодействия в (6.27)(6.29) можно рассматривать "включения" дополнительного заряда Z ($0 \rightarrow Z \rightarrow 1$) ("заряжение"). Для классической кулоновской системы это дает независимо от знака включаемого заряда.

$$\frac{\partial^2 \Delta\mu(Z)}{\partial Z^2} \leq 0 \quad 0 \geq \Delta\mu(Z) \geq \Delta u(Z)^1. \quad (6.43)$$

Неравенство (6.43) имеет важное следствие для модельного описания НТП с многократной ионизацией, когда снижение k -той ионизации ($i_{k-1} = i_k + e$) складывается из соответствующих поправок к химическим потенциалам электрона и ионов с зарядами $Z = k$ и $k - 1$

$$\Delta I_k = \Delta\mu_{k-1} - (\Delta\mu_k + \Delta\mu_e). \quad (6.44)$$

Из выпуклости $\Delta\mu(Z)$ как функции Z следует, что в классической кулоновской системе величина, эквивалентная термодинамическому снижению потенциала ионизации (6.44) должна быть неубывающей функцией кратности ионизации

$$\Delta I_k \geq \Delta I_{k-1} \quad (k = 1, 2, 3 \dots). \quad (6.45)$$

Неравенства (6.43)- (6.45) являются достаточно мягкими и удовлетворяются в большинстве используемых в термодинамике НТП модельных приближений, в частности, в обычном дебаевском приближении ($\Delta I_k \sim k$). В то же время они нарушаются ([59], [28]) в широко используемом т.наз. дебаевском приближении в большом каноническом ансамбле (БКА [101]) при экстраполяции этого приближения в область сильной неидеальности (при $\Gamma \geq \Gamma^* \cong 0.36$ т.е. при $\Gamma^* \cong 0.78$ [30], [32]).

6.2.6 Экстремальные свойства энтропии

Дополнительное введение одного из параметров, характеризующих межчастичное взаимодействие в системе - "константы связи", λ , в число полноправных термодинамических переменных может быть естественно расширено на всю совокупность одно-, двух- и т.д. s -частичных потенциалов взаимодействия $\{V_1(r), V_2(r, r'), V_3(r, r', r'') \dots\}$. При этом каждый из термодинамических потенциалов приобретает смысл производящего функционала [14] от s -частичных потенциалов взаимодействия.

$$F \equiv F(N, V, T|[V_1, V_2, V_3, \dots])$$

Формально последовательность потенциалов $\{V_s(r_i \dots, r_j)\}$ бесконечна, но актуальным в большинстве реальных ситуаций является знание зависимости свободной энергии, F , от одночастичного внешнего потенциала, $V_1(r)$, и парного бинарно-аддитивного потенциала $V_2(r, r') \equiv V_2(|r - r'|)$. Соответственно, обобщенным условием Б выпуклости каждого термодинамического потенциала относительно дополнительных интенсивных переменных V_1 и V_2 является условие выпуклости $F \equiv$

¹ $\Delta u(z)$ - энергия взаимодействия включаемого заряда, z , с плазмой

$F(N, V, T|[V_1, V_2, V_3, \dots])$ (знакопостоянства производной $(\delta^2 F/\delta V(x)\delta V(y))$) для любых вариаций потенциалов $\delta V_i(r)$, не нарушающих термодинамического равновесия в системе.

$$\langle \delta V_i(r) | \delta^2 F / \delta V_i(r) \delta V_i(r') | \delta V_i(r') \rangle \leq 0 \quad (i = 1, 2). \quad (6.46)$$

В термодинамической классификации (4.1) s -частичные потенциалы взаимодействия $V_S(r, r', \dots, r^S)$ играют роль интенсивных переменных. Существенно, что экстенсивными переменными, термодинамически сопряженными потенциалам V_s , являются s -частичные корреляционные функции, $F_s(r, r' \dots, r_s)$ [9], [142].

$$\frac{\delta F}{\delta V_1(\mathbf{r})} \equiv \left[\frac{\delta F}{\delta V_1(\mathbf{r})} \right]_{N,T,V} = \left[\frac{\delta \Omega}{\delta V_1(\mathbf{r})} \right]_{\mu,T,V} = \dots = \langle N(\mathbf{r}) \rangle \equiv n_1(\mathbf{r}) \equiv nF_1(\mathbf{r}), \quad (6.47)$$

$$\frac{\delta F}{\delta V_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})} = \left(\frac{N^2}{2V} \right) F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \left(\frac{V}{2} \right) n_1(\mathbf{x})n_1(\mathbf{y})[h_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - 1]. \quad (6.48)$$

В частности, в однородном случае

$$V_1(\mathbf{r}) \equiv 0, \quad n(\mathbf{r}) \equiv n = const, \quad F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = F_2(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = F_2(r),$$

$$\frac{\delta (F/V)}{\delta V_2(r)} = \left(\frac{n^2}{2} \right) F_2(r) = \left(\frac{n^2}{2} \right) [h_{12}(r) - 1]. \quad (6.49)$$

$$\frac{\delta F}{\delta V_2(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)} = n_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv n_1(\mathbf{r})n_1(\mathbf{r}')F_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (6.50)$$

Одним из важных следствий этой сопряженности $V_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s) \Leftrightarrow F_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ является то, что преобразование Лежандра, меняющее ролями зависимые и независимые термодинамически сопряженные переменные, в классической системе приводит к переходу от неидеальной составляющей свободной энергии $\Delta F(N, T, V|V_1(\mathbf{r}), V_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}))$ - термодинамического потенциала в переменных $V_s(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_s)$ - к неидеальной составляющей энтропии, как к термодинамическому потенциалу, для которого естественными переменными являются $F_1(\mathbf{x})$ и $F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ [185]:

$$\Delta F\{V_1(\mathbf{x}), V_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})\} \Leftrightarrow \Delta S\{F_1(\mathbf{x}), F_2(\mathbf{x}, \mathbf{y})\}.$$

Упомянутым во введении данного раздела внутренним степеням свободы соответствует набор s -частичных корреляционных функций, распоряжаясь которыми, система стремится достичь экстремума свободной энергии при фиксированных переменных V, T, N и потенциалах $\{V_1(\mathbf{r}), V_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \dots\}$. Необходимым условием минимальности свободной энергии является эквивалентная (6.46) положительность квадратичной формы (вогнутость функционала $F(N, V, T|[F_1, F_2, \dots])$) [185]

$$\langle \delta F_i(\mathbf{r}) | \delta^2 F / \delta F_i(\mathbf{r}) \delta F_i(\mathbf{r}') | \delta F_i(\mathbf{r}') \rangle \geq 0 \quad (i = 1, 2). \quad (6.51)$$

В термодинамике плазмы (и в других областях физики) плодотворным оказался подход, систематически использующий это свойство экстремальности свободной энергии в однокомпонентном варианте - в приложении к теории равновесного неоднородного электронного газа (метод функционала плотности [134], [228], см. также ЭНТП-III.1.4 [160]).

Формулировка эквивалента вариационного принципа статистической механики (уровень старшей функции распределения) на языке "младших" функций распределения завершается при переходе к энтропии, как термодинамическому потенциалу (функционалу) не только от координатных корреляционных функций, но и от функции распределения по импульсам [185], [134].

Выпуклость термодинамических потенциалов, как функций от интенсивных переменных (включая константу связи), и отсутствие возможности фазового расслоения в соответствующем ансамбле, соответствует содержанию теоремы Ван Хофа [154] для термического уравнения состояния в большом каноническом ансамбле. [220], [251] (см.подробнее [196], [193], [32]).

6.2.7 Приложения вариационного принципа

Вариационный принцип статистической механики играет важную роль в теории неидеальных систем, являясь основой метода построения приближений (см.например [95], [185], [134], [228]), альтернативных приближениям, получаемым в рамках традиционного аппарата асимптотических разложений по малому параметру. Помимо этого вариационная формулировка проблемы неидеальности выполняет важную методическую роль - "генератора" последовательностей (цепочек) упрощенных моделей. Использование s-частичных корреляторов как независимых переменных позволяет, последовательно "выключая" одну за другой различные корреляции в системе (и тем самым, формально упрощая описание её термодинамики), получать такую цепочку моделей, упорядоченных по возрастанию свободной энергии (или иного термодинамического потенциала). На одном конце этой цепочки расположена реальная система с наинизшей согласно ВПСМ свободной энергией, на другом - идеальный газ, как система с полностью выключенными динамическими корреляциями. Различные способы такого "выключения" приводят к различным последовательностям идеализированных моделей плазмы, каждая из которых позволяет ценою постепенного усложнения модели строить все более и более точное "в целом" приближение.

6.2.8 Безассоциативные модели плазмы (БМП)

Одним из примеров указанного выше использования вариационного принципа статистической механики (ВПСМ) является генерация семейства так называемое безассоциативных моделей плазмы (БМП) [64], [66]. Согласно ВПСМ, свободная энергия системы, $F[\rho_N]$, до-определенная на случай произвольной неравновесной функции распределения ρ_N , на равновесной функции распределения ρ_N^0 минимальна (см.например, [77]).

$$F[\rho_N] \equiv Sp\{\rho_N(\mathbf{H}_N^* + kT L n \rho_N)\} \geq F[\rho_N^0], \quad (6.52)$$

$$\rho_N^0 \equiv \exp(-\mathbf{H}_N^*/kT)/Sp\{\exp(-\mathbf{H}_N^*/kT)\}.$$

Простейшее применение (6.52) к плазме состоит в замене функции распределения реальной системы ядер и электронов $\rho_{N(+)N(-)}$ на произведение двух сомножителей, отвечающих отдельно подсистеме ядер и подсистеме электронов

$$\rho_{N(+)N(-)} = \rho_{N(+)} \rho_{N(-)}. \quad (6.53)$$

продвинуться в модификации диаграммных методов теории разложений по малому параметру ("пересуммировании") [133] и стимулируя тем самым поиски аналогичных (по методологии) модификаций в построении специфических асимптотических разложений для кулоновских систем (см. например [238], [239], [18], [165], и др.). Традиционная химическая термодинамика обладает разработанным формализмом в описании многокомпонентных систем с переменным числом частиц (химическими реакциям). Сегодняшняя так называемая "химическая модель плазмы" практически эквивалентна в формальном отношении этому формализму (см. §7.2, [32], [140], [160] и др.). Вместе с тем термодинамическое равновесие в плазме (и общее - в системе кулоновских частиц) имеет ряд особенностей, принципиально отличающих его (это равновесие) от ситуации в системе с короткодействием. Главной из которых является роль и особые свойства условия электронейтральности плазмы. Основной источник этих отличий - дальнедействующий характер кулоновского взаимодействия на далеких расстояниях, а потому обсуждаемые особенности не связаны напрямую с квантовыми эффектами и, стало быть, в полной мере проявляются и в классических кулоновских системах. Известная расходимость кулоновского потенциала (и его квадрата, и куба) на далеких расстояниях приводит среди своих следствий к появлению элементов нелокальности в термодинамике плазмы и к "расщеплению" некоторых единых прежде термодинамических объектов на разные по своей роли и свойствам варианты (см. ниже). Все эти черты термодинамического равновесия в плазме находят свое выражение в первую очередь и в специфических аспектах проблемы термодинамической устойчивости кулоновских систем, имеющей более сложный характер, нежели та же проблема в системах с короткодействием (включая и многокомпонентные системы).

6.3.1 Особенности термодинамического равновесия в плазме

Термодинамическое равновесие в плазме принципиально отличается от равновесия в системах с короткодействием. Прежде всего это касается характера термодинамического предела в системе кулоновских частиц.

В традиционном изложении все термодинамические функции плазмы, например, свободная энергия $F(\mathbf{N}, V, T)$, явным образом определяются первоначально для конечной системы (\mathbf{N}, V, T) ([153], [98], [154] и др.). Центральным моментом дальнейшего построения является поиск термодинамического предела, то-есть предельных значений удельных величин, скажем, удельной свободной энергии $f(\mathbf{N}, V, T) \equiv F(\mathbf{N}, V, T)/V$, как функции температуры и (сокращенного) набора удельных параметров, $\mathbf{n} \equiv \mathbf{N}/V$ и T .

$$f(\mathbf{n}, T) = \text{Lim} f(\mathbf{N}, V, T) \equiv \text{Lim} \left\{ \frac{F(\mathbf{N}, V, T)}{V} \right\}, \quad (6.54)$$

$$\{\mathbf{N} \rightarrow \infty, V \rightarrow \infty, \frac{\mathbf{N}}{V} \rightarrow \mathbf{n} = \text{const.}\}$$

Существование такого типа предела принципиально для использования предельных (удельных) термодинамических зависимостей $f(\mathbf{n}, T)$, $p(\mathbf{n}, T)$, $u(\mathbf{n}, T)$, $\mu(\mathbf{n}, T)$ и т.д., для описания статики, динамики и эффектов переноса в обычной (некулоновской) неоднородной среде в рамках так называемое приближения "локального термодинамического равновесия" (ЛТР) с использованием полей температур и концентраций

- $T(\mathbf{r})$ и $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, однозначно определяющих поля всех остальных термодинамических характеристик $f(\mathbf{r}), p(\mathbf{r}), u(\mathbf{r}), \mu(\mathbf{r})$ и т.д. В общем случае предполагается (или специально доказывается) что этот предел, если он для данного типа взаимодействия существует, зависит только от предельных значений термодинамических параметров - \mathbf{n} и T и не зависит от способа перехода к пределу (6.54). Для плазмы это не так. Термодинамический предел здесь существенно зависит от способа перехода к пределу. Хорошо известны два источника такой зависимости. Это - дисбаланс заряда (отклонение от электронейтральности в процессе перехода к пределу (6.54)) и влияние поля приповерхностной неоднородности (приграничный двойной электрический слой, или что то же - приповерхностный "диполь" и т.д.).

6.3.2 Дисбаланс заряда

В 1969 году Либ и Лебовиц в работе [231] (полный текст в [232]) доказали ряд теорем, касающихся существования и свойств термодинамического предела в кулоновских системах. Одним из основных результатов работы [231], [232]) является утверждение, что в большом каноническом ансамбле кулоновская система всегда стремится к полной электронейтральности, независимо от выбранных значений химических потенциалов ионов и электронов μ_i и μ_e .

$$\lim [V^{-1} (\sum N_i Z_i - N_e)] = 0. \quad (6.55)$$

При этом удельная свободная энергия системы $f(\mathbf{N}, V, T)$ стремится к тому же пределу $f(\mathbf{n}, T)$, что и удельная свободная энергия соответствующей кулоновской системы в каноническом ансамбле (где независимыми переменными являются концентрации N_i и N_e) но только при условии, что в процессе предельного перехода (6.54) условие электронейтральности либо выполняется точно (т.наз "электронейтральные канонический и большой канонический ансамбли")

$$\sum N_i Z_i e = N_e e. \quad (6.56)$$

либо дисбаланс отрицательного и положительного зарядов растет, но не быстрее, чем $V^{2/3}$. В противном случае предельная свободная энергия $f(\mathbf{n}, T, \Delta)$ либо зависит от суммарного дисбаланса заряда Δ {если $\Delta \equiv (\sum N_i Z_i e - N_e e) \sim V^{2/3}$ }, либо не существует вовсе {если $\Delta \sim V^{2/3+\varepsilon}, \varepsilon > 0$ }.

6.3.3 Приповерхностный двойной электрический слой

Определяющим обстоятельством, отличающим плазму от систем с короткодействием, является возможность появления внутри системы макроскопического поля за счет объемного или приповерхностного заряда, концентрация которого мала в сравнении с полным числом заряженных частиц, и не дающего, таким образом, вклада в условие электронейтральности (6.55) в термодинамическом пределе $V \rightarrow \infty$ (6.54). Известно, что электрическая емкость проводника пропорциональна его линейному размеру, таким образом, для того, чтобы при переходе к пределу $V \rightarrow \infty$ (6.54) потенциал системы оставался постоянным, необходим избыточный заряд, растущий как $V^{1/3}$, в то время как полный заряд каждой из подсистем (положительный и отрицательный) $\sim V^1$. При достаточно слабом росте избыточного заряда ($\Delta \sim V^{2/3-\varepsilon}, \varepsilon > 0$)

удельная свободная энергия в пределе (6.54) такая же, согласно теоремам Либа и Лебовица, как и для строго электронейтрального предела (6.56).

Основное утверждение настоящей работы заключается в том, что, однако, и в этом случае проблема не снимается полностью, поскольку постоянный потенциал конечной системы может быть создан и при нулевом (суммарно) избыточном заряде за счет, например, приповерхностного двойного электрического слоя. И это не единственная возможность. Сказанное означает, что даже в строго электронейтральном пределе (6.54)(6.56) среди совокупности термодинамических параметров остается хотя бы один, строго говоря нелокальный, параметр (или параметры) зависящий помимо предельных величин n и T от размера, формы сосуда, конкретных свойств поверхности и т.д. Таким параметром является отдельный химический потенциал каждого из сортов заряженных частиц - ионов и электронов - μ_i и μ_e .

6.3.4 Химический потенциала в кулоновской системе

Особенностью термодинамического равновесия в плазме, проистекающей из-за дальнедействующего характера кулоновского потенциала, является расщепление единого прежде понятия - химический потенциал - на два (или более) различных варианта: - "обычный" (локальный) химический потенциал (ХП) и т.наз электрохимический потенциал (ЭХП): μ и $\tilde{\mu}$. Последний хорошо известен в низкотемпературной электрофизике [2], [4], и был, по-видимому впервые, введен (Guggenheim-1939) (см [42]). В традиционном изложении ([143]) разница между двумя объектами в приложении к однородной кулоновской системе (электролит, плазма) выглядит не принципиальной: - ЭХП есть ХП с дополнительным (постоянным) слагаемым, пропорциональным величине ненулевого, вообще говоря, среднего потенциала в системе, φ .

$$\tilde{\mu}_i = \mu_i(\mathbf{n}, T) + e_i \varphi \quad (\varphi = const). \quad (6.57)$$

Тем не менее различие между двумя объектами принципиально и имеет далеко идущие последствия для смысла и использования ХП и ЭХП, в особенности в контексте проблемы термодинамической устойчивости кулоновских систем. Коротко это может быть выражено так: электрохимический потенциал, $\tilde{\mu}$, является наблюдаемой термодинамической величиной, но строго говоря, нелокальной, в то время как "обычный" химический потенциал, μ , является величиной локальной, но строго говоря, ненаблюдаемой.

6.3.5 Химический и электрохимический потенциалы

Как отмечено выше, аппарат теоретического описания плазмы, как многокомпонентной среды, в значительной мере выстроен в подобии, если не в полной формальной эквивалентности, соответствующему аппарату химической термодинамики (см.например [32], III.1.3 [160]). Главным объектом в таком описании является взаимозависимость набора химических потенциалов $\mu \equiv \{\mu_i\}$ и плотностей $\mathbf{n} \equiv \{n_i\}$ всех сортов частиц. В термодинамически устойчивом однофазном состоянии эта зависимость считается взаимно однозначной и положительно определенной (см.выше). В плазме, как уже говорилось, ситуация отлична потому, что существуют два варианта химических потенциалов, ХП и ЭХП. Какой из них участвует в каких из единых прежде многочисленных соотношений $\mathbf{n}(\mu)$, связывающих \mathbf{n} и μ .

1. Наблюдаемой величиной является электрохимический потенциал $\tilde{\mu}$. Он соответствует стандартному определению - независимой переменной в большом каноническом ансамбле и производной от соответствующего термодинамического потенциала - в каноническом и других ансамблях

$$\tilde{\mu} \equiv \left[\frac{\partial F(\mathbf{N}, V, T)}{\partial \mathbf{N}} \right]_{V, T} = \left[\frac{\partial G(\mathbf{N}, p, T)}{\partial \mathbf{N}} \right]_{p, T} = \dots \quad (6.58)$$

При этом в свободной энергии конечной кулоновской системы $F(\mathbf{N}, V, T)$ помимо зависимости от \mathbf{N}, V, T неявно содержится зависимость от нелокальных элементов, дисбаланса заряда, формы сосуда, свойств поверхности и т.д. (условно обозначаемых ниже символом \diamond)

$$F^{(Coul)}(\mathbf{N}, V, T) \equiv F(\mathbf{N}, V, T | \diamond). \quad (6.59)$$

Соответственно

$$\tilde{\mu}^{(Coul)} \equiv \tilde{\mu}(\mathbf{n}, T | \diamond). \quad (6.60)$$

В случае однородной системы предполагается (и насколько известно автору, окончательно не доказано) что вся нелокальность ЭХП (6.60) полностью исчерпывается постоянным по объему (за исключением тонких приповерхностных слоев) вторым слагаемым в (6.57), описывающим вклад потенциала среднего поля. ЭХП за вычетом этого слагаемого и фигурирует в большинстве случаев как определение (локального) химического потенциала μ . Т.е.:

$$\mu_i(\mathbf{n}, T) \equiv \tilde{\mu}_i(\mathbf{n}, T | \diamond) - e_i \varphi(| \diamond |) \quad (\varphi(| \diamond |) = const). \quad (6.61)$$

Именно так понимаемый локальный химический потенциал $\mu_i(\mathbf{n}, T)$ используется при описании динамики и эффектов переноса в слабо-неоднородной плазме в приближении ЛТР (см. главы 8-10). Следует подчеркнуть, что такое определение ХП (6.61) неудовлетворительно в общем случае, поскольку исходно как ХП, так и ЭХП должны быть определены для всей системы в целом, а средний потенциал в системе φ даже в отсутствие внешнего поля не обязан быть постоянным. Помимо случая фазового расщепления, который может быть сведен к двум (трем, четырем и т.д.) сосуществующим однородным фазам, возможны однофазные неоднородности - такие как регулярные "волны зарядовой плотности" (ВЗП) или неоднородности более сложной, нерегулярной формы, (ниже используется термин "электростатическое эхо" границ). В этом случае $\varphi = \varphi(\mathbf{r} | \diamond)$, и химический потенциал, определяемый при помощи (6.61), теряет свойство локальной, взаимно-однозначной зависимости только от термодинамических переменных - \mathbf{n} и T (6.61).

6.3.6 Условия локальной электронейтральности

Как уже отмечалось, одним из результатов теорем Либа и Лебовица [231], [232] является утверждение, что в термодинамическом пределе в большом каноническом ансамбле кулоновская система стремится к электронейтральности (6.62) независимо от выбранных значений химических потенциалов зарядов

$$\sum n_i Z_i = 0. \quad (6.62)$$

Выше подчеркивалось, что исходными переменными этого ансамбля являются электрохимические потенциалы $\tilde{\mu}_i$ и $\tilde{\mu}_e$. Таким образом, результат [231] означает,

что по отношению к вариациям этих переменных равенство (6.62) является не равенством, а тождеством. То есть равна нулю не только сумма (6.62) но и все её производные по $\tilde{\mu}_i$ и $\tilde{\mu}_e$ [59], [28], [30].

$$\sum n_i e_i \equiv 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \tilde{\mu}} \left(\sum n_i e_i \right) = 0, \quad \frac{\partial^{k+l}}{\partial \tilde{\mu}_{\alpha_1} \dots \partial \tilde{\mu}_{\alpha_k} \partial T^l} \left(\sum n_i e_i \right) = 0. \quad (6.63)$$

Учитывая связь производных $\partial \mathbf{n} / \partial \tilde{\mu}$ с корреляционными функциями, можно заключить, что последовательное дифференцирование (6.63) порождает бесконечную цепочку интегральных равенств, наложенных на s -частичные корреляционные функции плазмы, $g_s(r_1, \dots, r_s)$ [59], [28], [30]. Справедливость этих равенств, не связана с условием малости параметра неидеальности. Эти соотношения являются специфическими именно для кулоновской системы, и не обязаны выполняться в не-кулоновских системах с короткодействующими потенциалами. Помимо самого условия электронейтральности (6.62) "младшим" из указанных равенств является так называемое условие "локальной электронейтральности" - соотношение, наложенное на бинарные корреляционные функции плазмы. В простейшем случае однокомпонентной модели плазмы на несжимаемом (*rigid*) компенсирующем фоне [ОСР(\mathbf{r})] это соотношение имеет хорошо известный вид условия того, что полный заряд "экранирующего облака", окружающего в среднем каждый заряд в плазме, в точности равен величине экранируемого заряда со знаком минус (правило "нулевого момента" Стиллинджера и Ловетта [278]). В однокомпонентном случае

$$\left(\frac{\partial n}{\partial \tilde{\mu}} \right) = (kT)^{-1} \left\{ n + n^2 \int [g(r) - 1] dr^3 \right\} = 0. \quad (6.64)$$

Старшие из обсуждаемых равенств (6.63) выражают такого же рода свойства экранирования для группы из двух, трех и более частиц.

$$\int Q_i(r) d\mathbf{r} \equiv \int \sum n_\alpha e_\alpha \left[\frac{F_{s+1}(r_1, r_2, \dots, r_{s+1})}{F_s(r_1, r_2, \dots, r_s)} - 1 \right] d\mathbf{r}_{s+1} = -(z_1 + z_2 + \dots + z_s). \quad (6.65)$$

Здесь $Q_i(\mathbf{r})$ - профиль суммарного заряда экранирующего облака вокруг заряда " i ", и ограничения (6.65), наложенные на s -частичные корреляционные функции плазмы, играют в отношении последних роль своеобразных условий нормировки.

В итоге для плазмы считается справедливым следующее свойство:

★ Термодинамически равновесная система кулоновских частиц при погружении в нее любой конечной совокупности фиксированных зарядов полностью экранирует как полный заряд этой дополнительной системы зарядов, так и ее дипольный и квадрупольный моменты, так что результирующий средний потенциал на далеких расстояниях от системы внесенных зарядов не содержит расходящихся составляющих, $1/r$, $1/r^2$ и $1/r^3$.

В случае поля внешнего заряда, рассматриваемого как малое возмущение, отклик на него описывается статической диэлектрической проницаемостью, $\varepsilon^{-1}(x, y) \leftrightarrow \tilde{\varepsilon}_k^{-1}$. В известной работе Стиллинджера и Ловетта [278] соотношение (6.65) (условие "нулевого момента") вместе с условием "второго момента" (см ниже) рассматривались в приложении к классической ионной системе, как следствие физического требования, наложенного длинноволновой предел статической диэлектрической проницаемости,

и эквивалентного тому, что состояние системы является проводящим.

$$\tilde{\varepsilon}_k \rightarrow \infty \quad (k \rightarrow 0). \quad (6.66)$$

Свойство локальной электронейтральности накладывает жесткое ограничение на длинноволновой предел $\tilde{\varepsilon}_k^{-1}$ (6.66) и тем самым на комбинацию корреляционных функций системы, через которые величина $\tilde{\varepsilon}_k^{-1}$ выражается

$$\left\{ 1 - \tilde{V}_k \sum n_i z_i \left[z_i + \sum n_j z_j (\tilde{h}_k)_{ij} \right] \right\} \rightarrow 0, \quad \left(\tilde{V}_k \sim \left(\frac{4\pi e^2}{k^2} \right) \text{ при } k \rightarrow 0 \right), \quad (6.67)$$

$$\left\{ \varphi^*(x) \equiv \int [\varphi(y) \cdot \varepsilon^{-1}(x, y)] dy \leftrightarrow \varphi_k^* \equiv \frac{\varphi_k}{\tilde{\varepsilon}_k} \right\},$$

$$\sum n_j Z_j (\tilde{h}_k)_{ij} \sim -Z_i \left[1 - \left(\frac{k}{\kappa_D} \right)^2 + \dots \right]. \quad (6.68)$$

Существенно, что в многосортной системе зарядов при наличии отдельного условия "нулевого момента" для каждого сорта зарядов, условие "второго момента", (6.67), одно для всей системы.

В действительности считаются справедливыми более сильные условия типа (6.67), но для каждого сорта зарядов в отдельности. Другими словами, интегральные свойства плотности заряда, $Q_i(r)$, присущие дебаевскому приближению, справедливы в общем случае ($\Gamma \sim 1$), когда само приближение уже не применимо.

$$Q_i(k) \equiv \sum n_j z_j \tilde{h}_{ij}(k) = -z_i \left[1 - \left(\frac{k}{\kappa_D} \right)^2 + \dots \right]. \quad (6.69)$$

Или в координатном представлении:

$$\int Q_i(r) d\mathbf{r} \equiv \sum n_j z_j \int h_{ij}(r) d\mathbf{r} = -z_i \langle r^2 \rangle \equiv \frac{\int Q_i(r) r^2 d\mathbf{r}}{\int Q_i(r) d\mathbf{r}} = -6r_D^2. \quad (6.70)$$

Химический и электрохимический потенциалы в кулоновских системах

Специфика соотношения ХП и ЭХП наиболее отчетливо проявляется в ситуациях с термодинамически равновесной, но неоднородной плазмой. Два варианта такой ситуации важны в первую очередь - фазовое расслоение и задачи электростатики в приближении ЛТР.

6.3.7 Фазовое расслоение

В случае распада кулоновской системы на две (три, четыре и т.д.) однородные фазы проблема участия ХП и ЭХП в термодинамическом описании ситуации может быть согласно существующим представлениям сведена к соотношениям (6.57), (6.61) для каждой из сосуществующих фаз. Основным требованием фазового равновесия в этой ситуации является требование равенства электрохимических потенциалов обеих фаз. При этом значения химических потенциалов остаются, вообще говоря, различными

$$\tilde{\mu}' = \tilde{\mu}'' \quad \mu' \neq \mu''. \quad (6.71)$$

Отсюда следует важное следствие: - при различающихся химических потенциалах сосуществующих однородных фаз равенство электрохимических потенциалов (6.71) может быть обеспечено только за счет разницы в значениях среднего (однородного) электростатического потенциала сосуществующих фаз - φ' и φ'' . Поскольку химические потенциалы считаются локальными переменными, зависящими только от термодинамических параметров обеих фаз, \mathbf{n}', T и \mathbf{n}'', T , результирующая разность потенциалов на фазовой границе, $\Delta\varphi \equiv \varphi' - \varphi''$, оказывается чисто термодинамической величиной, определяемой только термодинамическими параметрами обеих фаз, и не зависящей от свойств поверхности раздела (чистоты, формы, поверхностных примесей и т.д.).

$$\Delta\varphi \equiv \varphi' - \varphi'' = \frac{1}{e_i} \{ [\mu_i(\mathbf{n}, T)]'' - [\mu_i(\mathbf{n}, T)]' \}, \quad (6.72)$$

(i - все заряженные компоненты) ($\varphi', \varphi'' = const$)

Существование такой "контактной" разности потенциалов на границе двух веществ, например металлов, хорошо известно в низкотемпературной электрофизике ([42], [2], [4] и др.). Вместе с тем существование подобного термодинамического скачка потенциала на любой фазовой границе и в высокотемпературной ситуации (плазме) не является хорошо осознанным фактом (см.5.5). Более того ситуация с потенциалом фазовой границы является часть более общего правила, которое может быть сформулировано следующим образом:

- Любая локальная неоднородность в термодинамически равновесной по обмену зарядами кулоновской системе, разделяющая две части этой системы, сопровождается в общем случае существованием стационарной разности потенциалов (скачка), величина которого полностью определяется термодинамическими параметрами сосуществующих частей (не обязательно разных фаз) и не зависит от детальных свойств указанной неоднородной зоны раздела.

6.3.8 Профиль свободных зарядов в неоднородном случае

Еще одной ситуацией, где различие ролей ХП и ЭХП проявляется достаточно отчетливо, является комплекс задач расчета в приближении ЛТР стационарного профиля пространственного заряда в окрестности источника неоднородности. Круг этих задач многообразен. Это расчет (в приближении ЛТР) профиля электронов в атомной ячейке (модели Томаса-Ферми и их локальные модификации [84]), близкий по идеологии расчет профиля свободных ионов вокруг полииона или заряженной мицеллы в полиэлектролитах, или вокруг КДФ-частицы в пылевой (dusty) плазме [47], [160], профиль самих термически равновесных КДФ-частиц в пылевой плазме вблизи заряженной стенки и многое другое.

Общим для всех этих ситуаций является возможность сформулировать их, как задачу на поиск экстремума термодинамического потенциала (например свободной энергии), как функционала от одночастичной плотности (плотностей) свободных зарядов $n(r)$ ($n_i(r)$) (4.46)-(4.48) [84]. Локальное уравнение состояния появляется в этой задаче при использовании приближения квазиоднородности в обменно-корреляционном члене F^* в правой части (4.47), когда в качестве $F(N, V, T)$ используется свобод-

ная энергия макроскопической системы зарядов (4.48):

$$F^*[n(\cdot)] = \int f(n(\mathbf{r}))n(\mathbf{r})d\mathbf{r}, \quad f(n) \equiv \lim \left\{ \frac{F(N, V, T)}{N} \right\}_{(N \rightarrow \infty, N/V=n)}. \quad (6.73)$$

В этом случае условие экстремума этого функционала можно выразить в дифференциальной форме, аналогичной (6.57), (6.61) через различающиеся химические и единый электрохимический потенциалы системы - $\mu(\mathbf{r})$ и $\tilde{\mu}$.

$$\tilde{\mu} = \mu[n(\mathbf{r}), T] + e\varphi(\mathbf{r}) = \text{const}, \quad (6.74)$$

где $\mu(\mathbf{r})$ - локальный химический потенциал зарядов, определяемый приближенным локальным УРС, используемым для описания термодинамики зарядов (6.75) (приближение Томаса-Ферми или Пуассона-Больцмана и др.), а $\varphi(\mathbf{r})$ - зависящий от радиуса переменный средний потенциал системы, определяемый стандартным выражением (6.76)

$$\mu(\mathbf{r}) = \mu(n(\mathbf{r}), T) = \left(\frac{\partial f(n(\mathbf{r}), T)}{\partial n} \right)_T, \quad f(n, T) \equiv \lim \left\{ \frac{F(N, V, T)}{N} \right\}_{(N \rightarrow \infty, N/V=n)}, \quad (6.75)$$

$$\varphi(\mathbf{r}) \equiv \varphi_{\text{external}}(\mathbf{r}) + Ze \int \left\{ \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right\} d\mathbf{r}' = \text{const}. \quad (6.76)$$

6.3.9 Химический и электрохимический потенциалы в условиях ТУ плазмы

Как уже указывалось выше, одним из главных результатов теорем Либа и Лебовица [231] является утверждение, что в термодинамическом пределе кулоновская система в большом каноническом ансамбле стремится к электронейтральности (6.62) независимо от выбранных значений (электро)химических потенциалов зарядов $\{\tilde{\mu}_i\}$. Это означает, что между значениями концентраций $\{n_i\}$ и электрохимических потенциалов $\{\tilde{\mu}_i\}$ в общем случае нет взаимно-однозначного соответствия. Наличие в равновесной кулоновской системе линейной зависимости (6.62) (6.63) эквивалентно равенству нулю определителя матрицы $\|\partial \mathbf{n} / \partial \tilde{\mu}\|$.

$$\det \|\partial \mathbf{n} / \partial \tilde{\mu}\| \rightarrow 0, \quad (\mathbf{N}, \mathbf{V} \rightarrow \infty, \quad \mathbf{N}/\mathbf{V} \rightarrow \text{const}). \quad (6.77)$$

Соотношение (6.77) не противоречит условию устойчивости термодинамического равновесия. Последнее требует положительной определенности матрицы $\|\partial \tilde{\mu} / \partial \mathbf{n}\|$. В плазме же по отношению к ЭХП выполняется более жесткое условие

$$\det \|\partial \tilde{\mu} / \partial \mathbf{n}\| = \{\det \|\partial \mathbf{n} / \partial \tilde{\mu}\|\}^{-1} \rightarrow +\infty, \quad (\mathbf{N}, \mathbf{V} \rightarrow \infty, \quad \mathbf{N}/\mathbf{V} \rightarrow \text{const}). \quad (6.78)$$

Это означает хорошо известное свойство термодинамически равновесной плазмы, состоящее в том, что любые сколько-нибудь заметные (длинноволновые) отклонения в ней от электронейтральности столь энергетически невыгодны (в отличие от другой системы с потенциалом $V(r) \sim 1/r$ - гравитирующей системе) что плазма оказывается устойчивой по отношению к таким отклонениям чисто механически, даже и без вмешательства экстремальных свойств энтропии, как термодинамического потенциала относительно s -частичных корреляций в системе. То есть, по отношению

к таким флуктуациям удельная свободная энергия кулоновской системы при выполнении условия (6.63) не просто минимальна, но при переходе к пределу бесконечной системы этот минимум становится все более резким, что и выражается условием (6.78).

Относительно же вариаций концентраций $\{n_i\}$ и s -частичных корреляторов, не нарушающих условия электронейтральности, свободная энергия плазмы согласно теоремам [231] обладает необходимым для термодинамической устойчивости свойством вогнутости (6.11)(6.12).

Из условия (6.78) следует важное следствие. Суперустойчивость кулоновской системы в переменных ЭХП освобождает, вообще говоря, термодинамические зависимости с участием обычного (локального) химического потенциала μ от обязательного требования выполнения (6.16) для любых вариаций концентраций зарядов. Примером такой ситуации является модель однокомпонентной плазмы (ОКП). Хорошо известно (см. например обзоры [171], [211], [186]) что уже при $\Gamma \geq 3$ производная $(\partial\mu/\partial n)_T$ в этой модели отрицательна именно при участии в ней обычного (локального) химического потенциала μ . Та же производная с участием ЭХП положительна, но стремится к нулю в пределе бесконечной системы (6.64).

В целом, в проблеме роли и участия химического и электрохимического потенциалов в условиях термодинамической устойчивости плазмы есть еще целый ряд открытых вопросов, и теоретический анализ обсуждаемой проблемы далек от завершения.

Обсуждение соотношения ХП и ЭХП в плазме и их ролей в различных ситуациях с их участие можно подытожить в сводной таблице, помещаемой ниже.

ТАБЛИЦА $[\mu \Leftrightarrow \tilde{\mu}]$

6.3.10 Термодинамическая устойчивость в моделях плазмы

Дебаевское приближение (одно- и многократная ионизация)

Свойством простейшего, используемого в классической плазме, дебаевского приближения (см. 1.3.50-53 §III.1.3) является то, что условие (6.16) нарушается в нем при достижении параметром неидеальности Γ некоторого фиксированного значения независимо от степени ионизации НТП или же степени ее "разбавления" идеальным газом посторонних нейтральных частиц. Это так, например, в типичном случае НТП с малой примесью ("присадкой") легко ионизирующегося металла, "разбавленного" смесью с благородным газом. Это иллюстрирует тот факт, что нарушение (6.16), и соответствующая ему потеря термодинамической устойчивости, являются в этом приближении внутренним свойством подсистемы заряженных частиц.

Сказанное требует детализации в случае многократной ионизации (см. ниже). Для простейшего же случая плазмы с однократной ионизацией ($Z_{\pm} = \pm 1$) неравенство (6.16) нарушается в дебаевском приближении при $\Gamma \geq \Gamma_D^* = 4$. В случае многократной ионизации, когда в равновесии сосуществует набор ионов разной кратности $\{Z_i\}$ (как положительных, так и отрицательных), граница нарушения условия (6.16) в дебаевском приближении Γ^* ограничена сверху величиной Γ^{**} ,

$$\Gamma^* \leq \Gamma^{**} = \frac{4}{\langle Z^2 \rangle} \left\{ \langle Z^2 \rangle \equiv \frac{\sum n_i Z_i^2}{\sum n_i} \right\}. \quad (6.79)$$

Эта граница следует из соотношения (6.16) если в качестве входящей туда вариации вектора концентраций зарядов $\delta \mathbf{n}$ использовать форму $\delta \mathbf{n} = \lambda \cdot \mathbf{n}$. Для частного случая системы электронов и одного сорта ионов с зарядом Z граница (6.79) принимает вид

$$\Gamma \leq \Gamma_{D^*} = \frac{4}{Z}. \quad (6.80)$$

Примером кулоновской системы с положительными и отрицательными ионами разной кратности, для которых проблема возможного фазового расслоения с участием кулоновского взаимодействия является общей с аналогичной проблематикой для традиционной НТП, является т.н. "Пылевая плазма" (см. [47] и [160]), высоко-ионные жидкости и полиэлектролиты и др.

6.3.11 Однопараметрические приближения $\Delta F/NkT = f(\Gamma)$

Сказанное справедливо и в более общем случае, когда неидеальная подсистема заряженных частиц подобно обычному дебаевскому приближению приближенно описывается неизвестной, но однопараметрической (безразмерной) поправкой к свободной энергии, зависящей только от одного параметра неидеальности Γ (или другого эквивалентного ему параметра: Γ, N_D)

$$\frac{\Delta F}{NkT} \equiv N\Delta f(n, T) \approx N\Delta f(\Gamma). \quad (6.81)$$

Исторически в теории неидеальной плазмы широкое распространение приобрело предположение о возможности успешного описания термодинамики подсистемы свободных зарядов, включая случай умеренной неидеальности, $\Gamma \sim 1$, при помощи единой однопараметрической зависимости от Γ (6.81), совпадающей при $\Gamma \ll 1$

с обычным дебаевским приближением, и отличающейся от него при $\Gamma \geq 1$ более слабой зависимостью от Γ . В контексте проблемы термодинамической устойчивости следует подчеркнуть, что согласно неравенству Гиббса-Боголюбова (6.85) эта однопараметрическая зависимость свободной энергии от Γ , будучи по знаку отрицательной, обязана с ростом параметра неидеальности расти по абсолютной величине не слабее, чем Γ (или, что то же - $\Gamma^{2/3}$). Соответственно, поправка к давлению, $(\Delta p/kT)^{\text{кул}}$, будучи отрицательной, растет по абсолютной величине с ростом плотности не медленнее, чем $n^{4/3}$. Это равносильно тому, что в классической системе неравенство (6.16) неизбежно нарушается при $\Gamma \rightarrow \infty$. Это иллюстрирует факт невозможности рассматривать подсистему свободных зарядов в реальной НТП как одновременно классическую и чисто кулоновскую, так как в этом случае она термодинамически неустойчива ("коллапсирует") при любых значениях параметра Γ . Существенно, что одного лишь квантового эффекта нелокальности электронов, "не позволяющего" им "упасть" на точечные ионы (дифракционного эффекта), недостаточно для устойчивости системы. Известно [44], что для стабильности чисто кулоновской системы необходимо, чтобы хотя бы один из сортов составляющих плазму частиц подчинялся статистике Ферми.

Среди множества однопараметрических поправок на неидеальность, $\Delta f(\Gamma)$, исторически предложенных для описания подсистемы свободных зарядов, принято фиксировать момент (значение параметра Γ^*), когда в таком приближении нарушается условие устойчивости термодинамического равновесия (6.16). Укажем один пример в этом ряду - приближение, в котором реальная подсистема свободных зарядов, например протонов и электронов, заменяется суперпозицией двух совмещенных друг с другом ("вложенных") однокомпонентных кулоновских систем, взаимодействующих друг с другом лишь в среднем: - неидеального "электронного газа" плюс ОКП классических ионов (т.наз. "сдвоенная модель ОКП" [66]). В этой модели при низких температурах условие (6.16) нарушается при $\Gamma \geq \Gamma^* \cong 3, 8..(\Gamma^* \cong 12, 8..)$. При достаточно высоких температурах условие (6.16) в этой модели не нарушается вовсе. Соответственно, существует изотерма, для которой система при некоторой плотности демонстрирует критическое поведение: $(\partial p/\partial V)_T = 0$, $(\partial^2 p/\partial V^2)_T = 0$, $(\partial^3 p/\partial V^3)_T < 0$, и термодинамика системы при $T \leq T_{\text{кр}}$ описывается фазовой границей традиционной формы с верхней критической точкой [66] [282].

6.3.12 Компактные приближения в разложении по активности

Дебаевское приближение в большом каноническом ансамбле

Это приближение получается при учете асимптотически главного (по расходимости) класса так называемых "кольцевых" диаграмм в модифицированном разложении большого термодинамического потенциала плазмы, $\Omega(\mu, V, T)$, по степеням активности, $z \equiv \exp\{\beta\mu\}$ в классическом пределе $n\lambda_e^3 \ll 1$ (см.подробнее часть 3). Результатом является простое и компактное приближение, выражающее в неявной форме зависимость поправок на неидеальность плазмы, ΔY (где $Y = F, U, p, \mu, \text{etc.}$) от концентрации. Соответствующие формальные выражения для случая однократной ионизации были получены в [101] и затем обобщены в работе [29] на случай многозарядной плазмы в форме удобной для численных расчетов (см.(5.24)(5.25))

Примечательным свойством этого простейшего кулоновского приближения яв-

ляется то, что условие (6.16) не нарушается в этом приближении ни при каких значениях параметра неидеальности Γ независимо от кратности ионизации НТП или степени ее "разбавления" нейтральными частицами [59], [63].

6.3.13 Плазменное разложение по степеням активности

Вышеописанное свойство дебаевского приближения в БКА является частным случаем более общего утверждения:

(#) Всякое приближение, полученное в виде конечного аналитического выражения для большого термодинамического потенциала $\Omega(\mu, V, T)$, как функции от набора химических потенциалов, не нарушает условия устойчивости термодинамического равновесия (6.16) ни при каких параметрах, и следовательно, в принципе не может воспроизвести УРС с "Ван дер Ваальсовыми" петлями в зависимости $p(V)_{T=const}$, или, что более важно, в общем случае для зависимости $\mu(\mathbf{n})$.

Следствием этого правила, совпадающего для зависимости $p(V)$ с содержанием теоремы Ван Хова [153], является то, что любое приближение, полученное частичным суммированием диаграмм в разложении $\Omega(\mu, V, T)$ по активностям, и выражающееся в окончательном виде в рамках компактного аналитического выражения, является априори термодинамически устойчивым при любых степенях неидеальности (и кратности ионизации). Это справедливо, в частности, в отношении приближения Планка-Веденова-Ларкина [18], а также и в отношении приближения, учитывающего вклад старших диаграмм $\sim \zeta^{5/2}$ [92], а также так называемого "лестничного" приближения из "эранированных потенциалов" в разложении по активности (см. III.1.2 [160]) и его модификации - т.наз. приближения АСТЕХ (F.Rogers et al. [267]), также полученного в рамках (достаточно громоздкого) частичного пересуммирования плазменного разложения по степеням активностей.

Указанное свойство также справедливо в отношении модифицированного приближения для описания эффекта взаимодействия заряд-нейтрал [58] (см. §1.6 в [32] и формулы (1.3.77-79) §III.1.3 [160]), также полученного частичным суммированием бесконечного класса диаграмм в разложении по степеням активности. Подчеркнем, что все перечисленные приближения не нарушают условия термодинамической устойчивости ни при каких степенях сжатия плазмы, несмотря на притягивательный характер учитываемого взаимодействия [59], [32].

Вместе с тем в большинстве вышеуказанных приближений, полученных частичным суммированием диаграмм в разложении $\Omega(\mu, V, T)$ по активности, включая и приближение ВДН (5.24)(5.25), нарушается неравенство Гиббса - Боголюбова, дополняющее совокупность неравенств, выражающих свойство выпуклости свободной энергии относительно интенсивных переменных [59]. Согласно этому неравенству свободная энергия, $F(V, T, N|\lambda)$ как функция от константы связи межчастичного взаимодействия, $V(r, \lambda) \equiv \lambda V(r)$, должна быть выпуклой функцией параметра λ

$$\left\{ \frac{\partial^2 F(V, T, N|\lambda)}{\partial \lambda^2} \right\} \leq 0 \quad (6.82)$$

В случае кулоновского взаимодействия $\lambda \equiv e^2$. При использовании для приближенного описания кулоновской поправки на неидеальность в однократно ионизованной

плазме однопараметрической зависимости, $\Delta f(\Gamma)$

$$\frac{\Delta F_{\text{кул}}}{N_{\text{заряж}} kT} \equiv \Delta f(\Gamma) \quad \frac{U_{\text{кул}}}{N_{\text{заряж}} kT} = \Gamma \left(\frac{d\Delta f(\Gamma)}{d\Gamma} \right) \quad (6.83)$$

неравенство (6.82) имеет вид:

$$\left(\frac{d^2 \Delta f(\Gamma)}{d\Gamma^2} \right) \leq 0, \quad (6.84)$$

$$\left(\frac{d \ln \left| \frac{U_{\text{кул}}}{N_{\text{заряж}} kT} \right|}{d \ln \Gamma} \right) \equiv \frac{3}{2} \left(\frac{\partial \ln \left| \frac{U_{\text{кул}}}{N_{\text{заряж}} kT} \right|}{\partial \ln \Gamma} \right) \geq 1, \quad (6.85)$$

$$0 \geq \left(\frac{\Delta F_{\text{кул}}}{N_{\text{заряж}} kT} \right) \geq \frac{3}{4} \left(\frac{\mu}{kT} \right) \geq \left(\frac{\Delta U}{N_{\text{заряж}} kT} \right) \equiv 3 \left(\frac{\Delta p}{n_{\text{заряж}} kT} \right). \quad (6.86)$$

Согласно (6.85) поправка на неидеальность, $U_{\text{кул}}/(N_i + N_e) = (1/3)\Delta p_{\text{кул}}/(n_i + n_e)$, обязана с ростом Γ расти по абсолютной величине не медленнее, чем первая степень Γ (или $\Gamma^{2/3}$). В приближении ВДН (5.24)(5.25) ограничение (6.85) нарушается при $\Gamma \geq \Gamma^* \approx 0.78 \dots$ ($\Gamma \geq \Gamma^* \approx 0.38 \dots$) [59], [28].

6.4 Фазовые переходы в плазме

Среди термодинамических последствий наличия в системе межчастичного притяжения можно условно выделить два ведущих механизма - образование конечных ассоциаций (комплексов) и фазовый переход (ФП). Оба механизма в значительной мере являются конкурирующими. Повышенная роль одного из них подавляет другой. И наоборот. В этом смысле показателен пример электрон-протонной системы (НТП водорода). Относительно сильное по энергии (в сравнении с образованием атомов) молекулообразование $H_2 = 2H$ ($D_{H_2} \sim 0.3 \cdot I_H$) "подавляет" обычную конденсацию, оттесняя ее в область криогенных температур - $T_{\text{кр}} \approx 30 \text{ K}$, много меньших как величины потенциала ионизации I_H , так и энергии диссоциации молекулы водорода $D_{H_2} \{T_{\text{кр}} \approx 0.2 \cdot 10^{-3} I_H\}$ (см. рис. 6.5).

Близкий к водороду пример масс-симметричной кулоновской системы - электрон-позитронная плазма - имеет из-за равенства масс существенно иную энергетику комплексообразования ($I_p \sim Ry/2 \cong 6,8 \text{ эВ}$, $D_{p_2} \ll I_p \approx 0.2 \text{ эВ}$). То же правило с некоторыми оговорками справедливо и для другой масс-симметричной кулоновской системы - электрон-дырочной плазмы в полупроводниках [29] ($T_{\text{кр}} \approx 0.15 \cdot I$) (см. также [136], [21]).

Наконец, на краю этого спектра находится модельная кулоновская система, где образование ассоциаций отсутствует по определению. Это вариант модели однокомпонентной плазмы (ОКП) - система зарядов одного знака на однородном и сжимаемом (в целом) компенсирующем фоне заряда противоположного знака ОКП(r), а также близкая к ней "сдвоенная модель ОКП" (ДОСР) [66]. Появляющийся в этих моделях дополнительный (помимо кристаллизации) фазовый переход флюид-флюид (ФП) имеет примечательно высокую критическую температуру, $kT_{\text{кр}} \cong 0.1Ry$ [214].

На противоположном краю обсуждаемого спектра кулоновских систем находится также модельная классическая система зарядов с модифицированным потенциалом

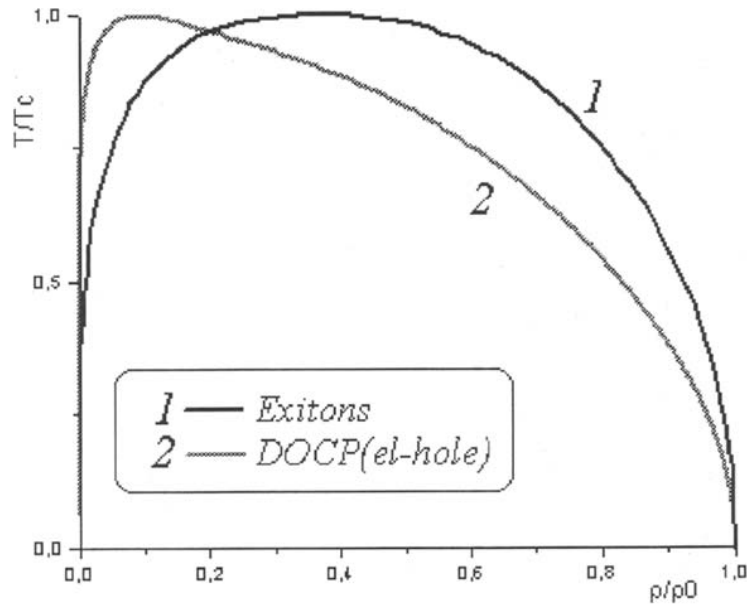


Рис. 6.5: Граница кривой равновесия перехода газ-жидкость в электрон-дырочной плазме в относительных координатах: $\rho/\rho_C - T/T_C$ (ρ_C и T_C - плотность и температура в критической точке перехода в системе). Обозначения: 1 - экспериментальная граница равновесия в фотовозбужденном кремнии (данные из [21], 2 - Граница равновесия в идеализированной безассоциативной модели электрон-дырочной плазмы ("сдвоенной" модели DOCP(c) [64], [66]) по данным работы [215])

Хеллмана - Глаубермана - Юхновского [25]:

$$V_{i,j}(r) = Z_i Z_j V(r) = Z_i Z_j \left(\frac{e^2}{r} \right) \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right) \right], \quad (6.87)$$

(модель включает примечательный вариант резко несимметричной плазмы - $|Z^{(+)}| \gg |Z^{(-)}|$). Важным свойством этой модели является то, что потенциал (6.87) относится к классу т.н. "положительно определенных" парных потенциалов (см. [123]), что является важным условием для существования и свойств термодинамического предела в такой системе. В частности, для любой конфигурации электронейтральной системы зарядов ($Z^{(+)} = Z$, $Z^{(-)} = -1$, $n_{(+)} = Zn_{(-)}$) с потенциалом (6.87) справедливо ограничение [59], [73]

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_s) \geq U_{\min} = -n_{(+)} \frac{Z(Z+1)}{2} V(0). \quad (6.88)$$

Правая часть (6.88) есть энергия идеального газа нейтральных "квазиатомов". В связи с этим есть основания полагать, что ФП газ-жидкость в этой модели вовсе отсутствует, так что весь эффект межчастичного притяжения исчерпывается образованием конечных заряженных или нейтральных комплексов ("ионов" и "атомов"). Таким образом, в балансе между ФП и образованием конечных ассоциатов в системе, где межчастичное взаимодействие включает как притяжение, так и отталкивание, центральной является проблема: насколько межчастичное притяжение обладает свойством "насыщения", т.е. насколько частицы, вступая во взаимодействие друг с

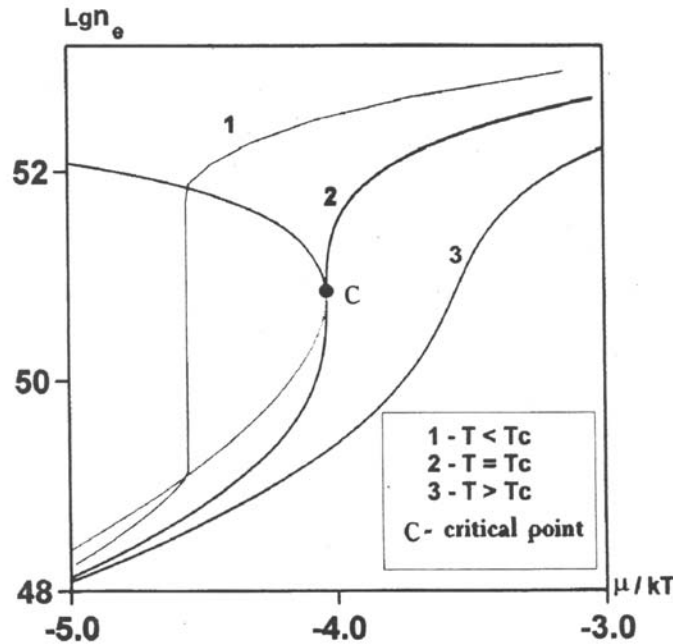


Рис. 6.6: Фазовый переход флюид-флюид в модели ОСР(с) в большом каноническом $(n - \mu)$ - ансамбле (ОКП ионов на однородно-сжимаемом фоне идеального ферми-газа электронов (по результатам [66], [215]) Обозначения: 1 - докритическая изотерма $T < T_{кр}$, 2 - критическая изотерма $T = T_{кр}$, 3 - закритическая изотерма $T > T_{кр}$, C - критическая точка перехода в модели [66]

другом в рамках ассоциации, ослабляют эффект притяжения партнера (или партнеров) с остальными частицами вне ассоциации.

В приложении к плазме полезно различать два подхода к проблеме ПФП. В первом - предположение о ФП возникает в рамках анализа приближенного уравнения состояния, именно как уравнения. Примером служит уравнение Ван дер Ваальса, но с "кулоновского" типа членом, описывающим притяжение (например, дебаевского типа, $\Delta P \sim n^{3/2}$, либо квазикристаллического типа, $\Delta P \sim n^{4/3}$ [102], [240]). Во втором подходе объектом анализа является модельная система многих тел - то есть совокупность частиц, с точно определенными степенями свободы, потенциалами взаимодействия и правилами, определяющими вклад этих степеней свободы в термодинамику системы. Известный пример такого рода - модель заряженных или нейтральных твердых шаров [242], [236] и модель Ван дер Ваальса [83].

Первый подход, фактически является алгебраическим анализом приближенного уравнения состояния на наличие в нем т. наз "петель Ван дер Ваальса". Второй же - фактически может оказаться сложной вычислительной проблемой, но существенно, что наличие или отсутствие в этом подходе предсказываемого ПФП допускает прямую проверку методами численного моделирования (см.раздел VII [160]). Результатом первого подхода являются кривые (изотермы), включающие участки термодинамически неустойчивых состояний ("петли") и критические точки (если они есть).

Результатом второго подхода является ФП в его прямом смысле, т.е. самопроизвольный распад однородного состояния термодинамически равновесной системы многих тел на различные фазы в $\{N, V, T\}$ -ансамбле, или связанный с ФП скачок плотности как функции химического потенциала в $\{\mu, V, T\}$ -ансамбле (рис. 6.6).

Результат второго подхода, в частности, способен воспроизводить аномальное, неаналитическое поведение в окрестности критической точки. В теории плазмы сегодня представлены оба подхода, причем на долю первого приходится доминирующее количество усилий. По-видимому, оптимальным является их сочетание, примером которого может служить ситуация, сложившаяся в теории ионных жидкостей [236]. Здесь накопление результатов прецизионных измерений, включая исследования в близкой окрестности критической точки с одной стороны, а также результаты многочисленных расчетов в рамках прямого численного моделирования, с другой стороны [19], [234], [258], [200], сочетаются с детальным анализом особенностей приближенных уравнений состояния, что позволяет в рамках общего анализа проблемы получать важные выводы [236].

Подобное развитие в теории ПФП затруднено тем обстоятельством, что для подавляющего большинства металлов реальная критическая точка перехода газ - жидкость, а также критическая точка гипотетического ПФП, предсказываемого, например, в водороде или инертных газах (см.ниже), расположена (по оценкам) при достаточно высоких параметрах ($T_C \sim 5 \div 20 \text{ кК}$, $p_C \sim 0.1 \div 2 \text{ ГПа}$ [69]), так что само обнаружение, а тем более прецизионное экспериментальное изучение околоскритического поведения, крайне затруднено (см.раздел I), а теоретические оценки и попытки далекой экстраполяции низкотемпературных свойств конденсированной фазы [69], [103], [68], [74] страдают крайней неопределенностью (см.ниже §§ 6.4, 6.5).

6.4.1 Особенности "обычных" переходов газ-жидкость в плазме

Переходы флюид-флюид в кулоновских системах

Если оставить на время в стороне проблему кристаллизации в системах с кулоновским взаимодействием, актуальную для некоторых специфических разновидностей НТП, таких как, например, пылевая плазма или возможная кристаллизация ядер в недрах астрофизических объектов, то многообразие ФП, происходящих (с большей или меньшей степенью гипотетичности) в неупорядоченном состоянии систем частиц с кулоновским взаимодействием, можно условно разделить на две категории, заметно различающиеся по своим свойствам (см. [73]):

- А) "Нормальные" (обычные) фазовые переходы
- Б) "Аномальные" (необычные) фазовые переходы.

"Нормальные" фазовые переходы - это фазовые переходы типа газ-жидкость с верхней критической точкой и с традиционной формой (связностью) фазовой границы, с положительной теплотой испарения, $\Delta H_{исп} \equiv H_{г} - H_{ж}$, и с положительным скачком удельного объема, $\Delta v_{исп} \equiv v_{г} - v_{ж}$, и соответственно, связанного с ним положительным скачком фактора сжимаемости, $\Delta Z_{исп} \equiv (pV/RT)_{газ} - (pV/RT)_{жидк}$. В соответствии с уравнением Клапейрона - Клаузиуса это соответствует традиционной, монотонно растущей зависимости давления перехода от температуры $p_{sat}(T)$,

$$\left(\frac{dp}{dT} \right)_{sat} = \frac{\Delta S}{\Delta V} > 0, \quad \left\{ \left[\frac{d \ln p}{d(1/T)} \right]_{sat} = \frac{\Delta H}{\Delta Z_{исп}} > 0 \right\}. \quad (6.89)$$

Основной физической причиной, приводящей при понижении температуры к конденсации в плотную фазу, служит эффект выигрыша в энергии при переходе в

эту фазу над проигрышем в энтропии из-за доминирующего эффекта межчастичного притяжения. Основной реально существующий носитель данного типа ФП среди объектов НТП - это переход газ-жидкость в металлах (слабо проводящий газ \leftrightarrow проводящая жидкость (или кристалл)). Для данного типа переходов характерна важная роль, которую играет в их описании так называемая "холодная кривая" - предельная зависимость внутренней энергии (или давления) от удельного объема при нулевой температуре, $U(V)_{T=0}$, или $p(V)_{T=0}$. При больших удельных объемах "холодная кривая" содержит условную ветвь, соответствующую несуществующим состояниям с отрицательной сжимаемостью. Важной количественной характеристикой этого участка доминирующего притяжения является энергия сублимации $\Delta_s H^\circ$. В отношении этого типа ФП основным направлением исследований является (поиск) выявление черт "плазменности", т.е. специфических особенностей, связанных именно с кулоновским взаимодействием, в характеристиках этого типа переходов, в первую очередь в окрестности их критических точек. Исследования этого рода развиваются как для реальной НТП металлов, так и для идеализированных кулоновских моделей с традиционной структурой границы двухфазной области [64], [66], [236], [103].

Проведенные исследования позволяют выделить несколько отличительных признаков, характерных для ФП этой категории.

1. Аномально низкий уровень величины фактора сжимаемости в критической точке, $Z_{кр} \equiv p_{кр} V_{кр} / RT_{кр} \equiv p_{кр} / n_{кр} k_B T_{кр}$ ($n_{кр}$ - концентрация тяжелых частиц, ионов, атомов, молекул и т.д., в пересчете на атомы):

Щелочные металлы	от $Z_{кр}(Li) \approx 0.06 - 0.1$	до $Z_{кр}(Cs) \approx 0.2$,
Модели	$(\Delta p = \Delta p(OCP(c)))$ [66], [215],	$\rightarrow Z_{кр} \cong 0.2$
	$(\Delta p \sim n^{4/3})$ [240], [102],	$\rightarrow Z_{кр} = 0.29$,
Модель Ван дер Ваальса	(для сравнения)	
	$(\Delta p_{притяжения} \sim n^2)$,	$\rightarrow Z_{кр} = 0.375$

2. Резкая в сравнении с обычными ФП асимметрия фазовой границы в приведенных $\rho - T$ координатах (см.рис. 6.7). Количественной характеристикой этого эффекта служит отношение плотностей ($\rho_{кр} / \rho_0$): критической плотности $\rho_{кр}$, к "нормальной" ρ_0 (плотности вещества в нормальном состоянии). Для плазмы щелочных металлов это отношение составляет 4, 5 \div 5, 5 для большинства обычных непроводящих жидкостей $\sim 3 \div 4$, для чисто кулоновской модели ОКП [66], [214], [215] $\cong 12.6$, для модели заряженных твердых шаров (ЗТШ) это отношение составляет примерно ~ 20 .
3. Искривление т. наз "диаметра" фазовой границы (полусуммы плотностей сосуществующих газовой и конденсированной фаз, $d(T) \equiv (\rho_{ж} - \rho_{газ})/2$). Согласно полумпирическому "правилу прямолинейного диаметра" Кальете-Матгаса, диаметр пограничной кривой для подавляющего большинства непроводящих жидкостей представляет собой почти прямую линию вплоть до малой окрестности критической точки. Для цезия экспериментально [208], [96] и теоретически [214], [215] получено заметное искривление указанного диаметра (вниз) в окрестности критической точки.

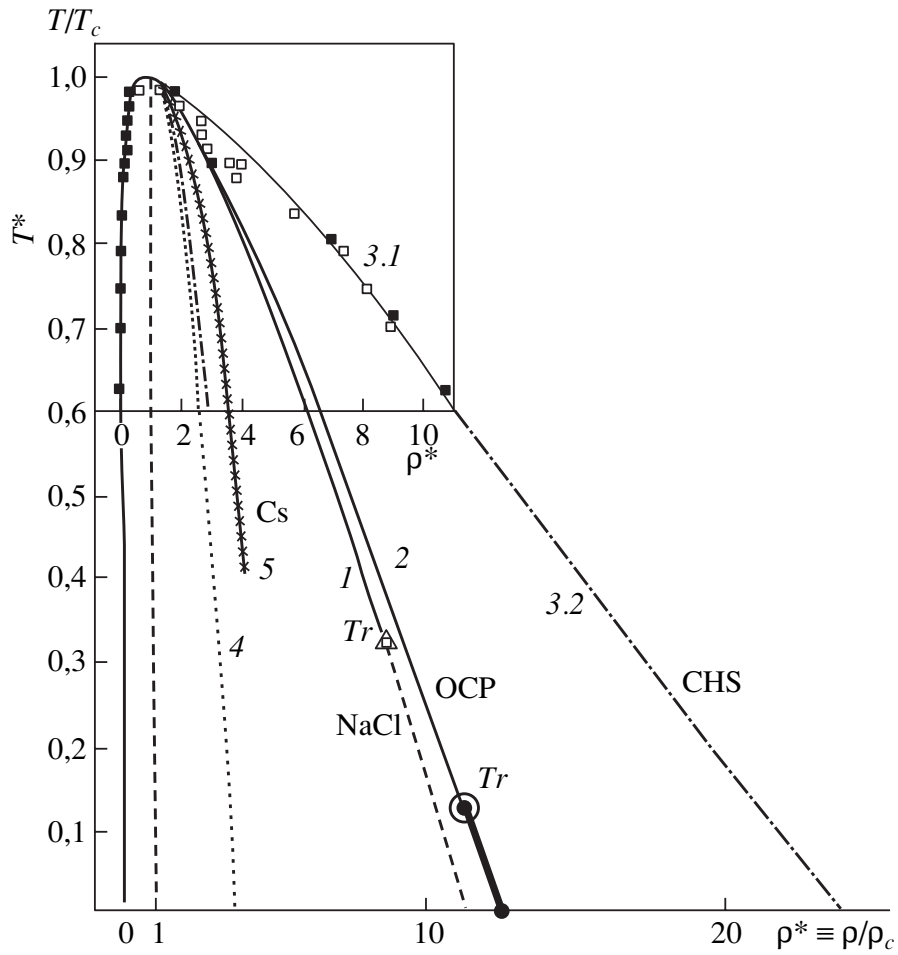


Рис. 6.7: Сводная диаграмма границы двухфазной области "нормального" фазового перехода fluid-fluid в относительных координатах (плотность - температура) в различных кулоновских системах [214]. Оозначения: 1 - ионная плазма ($Na^+ + Cl^-$). (По результатам МК-моделирования [200]), 2 - модель однокомпонентной плазмы классических ионов на однородно-сжимаемом компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов (ОСР(с)) [66] [214], Tr - тройная точка газ-жидкость-кристалл в модели ОСР(с) [215], 3 - модель заряженных твердых шаров (ЗТШ) равного радиуса ("примитивная модель электролита"): 3.1 - МК-моделирование [258], [181], 3.2 - низкотемпературная экстраполяция [199], 4 - граница перехода газ-жидкость в диэлектрических жидкостях (для сравнения), 5 - граница перехода газ-жидкость в цезии (по результатам эксперимента - [208], [96])

4. Относительно низкая величина критической температуры $kT_{\text{кр}}$, в сравнении с эффективной "глубиной" притяжения между частицами ε . Это характерно для типов межчастичного взаимодействия, обладающих признаками "насыщения". В кулоновской системе физическую роль насыщения, присущего химическому типу связей, играет экранирование. Известно, что для системы с потенциалом Ленарда-Джонса это отношение близко к единице ($kT_{\text{кр}}/\varepsilon \cong 1,35$). Для щелочных металлов оно имеет значение порядка $1/20$, если в качестве глубины ε использовать потенциал ионизации металла. В модели (ЗТШ), имеющей в районе фазового перехода газ - жидкость смешанный тип связи - кулоновское взаимодействие на фоне образования ассоциатов (двойников, тройников и т.д.), это отношение близко к $1/15$: $kT_{\text{кр}}/\varepsilon \cong 0.05$, где $\varepsilon \equiv Z^{(+)}Z^{(-)}\varepsilon^2/\sigma$ (см. [19]). Наконец, в чисто кулоновской модели ОСР(с) [66] нет индивидуальной характеристики парного притяжения зарядов. Характерным атрибутом обширного ФП в этой модели является отношение величины теплоты перехода при $T = 0$, $(\Delta_s H^o)$, к величине $kT_{\text{кр}}$. Ввиду запрета образования связанных комплексов в этой модели указанное отношение очень велико: $(\Delta_s H^o/kT_{\text{кр}}) \cong 18,6$ [214].
5. В серии работ А.А. Ликальтера [103], обосновывается утверждение, что следствием доминирующей роли кулоновского взаимодействия в окрестности критической точки должна служить тесная корреляция критических параметров с характеристикой этого типа взаимодействия - потенциалом ионизации атома I и, вообще говоря, неизвестной величиной валентности металла в критической точке $Z_{\text{кр}}$:

$$kT_{\text{кр}} \sim Z_{\text{кр}} I, \quad p_{\text{кр}} \sim (Z_{\text{кр}} I^2)^2 \rightarrow \frac{p_{\text{кр}}}{n_{\text{кр}} T_{\text{кр}}} \sim (1 + Z_{\text{кр}})^{-1} \approx const. \quad (6.90)$$

Есть основания полагать, что в сравнении с водородом щелочные металлы с точки зрения плазменности в своей конденсации демонстрируют смешанный тип поведения, где совмещаются кулоновские черты взаимодействия "квазиатомов" [102] с конкурирующим процессом димеризации ($A + A = A_2$) и чертами, присущими взаимодействию заряд-нейтрал [69].

6.4.2 Гипотетический "плазменный" фазовый переход

История вопроса [73]

Проблеме "плазменного" фазового перехода посвящено большое количество работ. Настоящее изложение следует [73]. Впервые вопрос о существовании дополнительного ФП между жидким и газообразным состоянием металлов со второй критической точкой, отличной от обычной критической точки перехода газ-жидкость, и связанной с переходом металл-диэлектрик, был поставлен Л.Д. Ландау и Я.Б. Зельдовичем [97]. В этой работе были высказаны предположения о возможности существования для металлов новых типов фазовых диаграмм, приведенных на рис. 6.8 (рис.из [97]). На рис. 6.8(а) показан первый тип гипотетической фазовой диаграммы для металлов. Отмечены области металлической жидкости (МЖ), "металлического" (проводящего) пара (МП) и диэлектрического (слабопроводящего) пара (ДП). Предполагается, что области МЖ, МП и ДП разделены линиями фазового перехода первого рода с

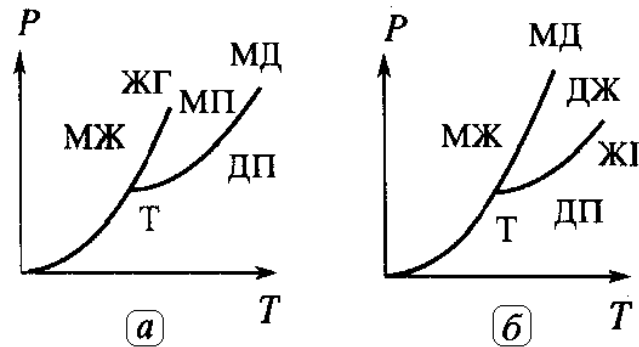


Рис. 6.8: Первый и второй тип гипотетической ФД-ПФП

соответствующими критическими точками (ЖГ и МД). "Т" - дополнительная тройная точка. На 6.8(б) показан второй тип гипотетической фазовой диаграммы для металлов. Предполагается, что жидкий металл (МЖ) переходит в диэлектрическую жидкость (ДЖ) на линии Т-МД, а на линии Т-ЖГ происходит превращение непроводящей фазы в газ (ДП). Отмечены соответствующими критическими точками, ЖГ и МД, и дополнительная тройная точка.

Для диаграммы, изображенной на рис. 6.8(б) предполагалось, что потеря металличности происходит путем ФП при температуре и давлении гораздо более высоких, чем для обычной критической точки жидкость - газ (для металла). Более поздняя модель, содержащая переходы жидкость - газ и металл - диэлектрик (причём последний в этой модели является ФП первого рода, и с ростом температуры превращается в ПФП) была предложена в работе [116]. Однако эксперименты, проведенные Кикоиным и Сенченковым, (1967) для паров ртути, не представили доказательств того, что резкий рост электропроводности с увеличением плотности, происходящий при температуре выше критической, является ФП первого рода. Многолетние экспериментальные исследования жидкого и газообразного цезия (см. [69]) также не подтвердили существования отдельного ФП, дополнительного к переходу газ - жидкость.

Норманом и Старостиним [120] было показано, что при рассмотрении термодинамики плотной плазмы необходим учет квантовых эффектов во взаимодействии заряженных частиц, когда тепловая дебройлевская длина волны электронов λ_e сравнивается с дебаевским радиусом экранирования кулоновского взаимодействия r_D . Учет квантовых поправок приводит из-за соотношения неопределенности к эффективному отталкиванию и может стабилизировать вторую фазу, приводя к наличию критической точки. На рис. 6.9 приведены изотермы неидеальной плазмы, содержащие ФП первого рода, предсказанные в этих работах [120], [122].

Отметим, что для низкотемпературной изотермы в области сосуществования гипотетического ПФП (см. вставку на рис. 6.9) существует средняя область, где условие выполняется. Однако эта область является неустойчивой из-за нарушения условий (1.12), (1.13). На рис. 6.10 и 6.11 схематически показан возможный вид границ гипотетического плазменного фазового перехода (Гипотетические кривые фазовых равновесий согласно [120], [122]. Сплошные линии - линии реального равновесия пара, жидкости и твердого тела, штрих - линии гипотетических фазовых равновесий. Для штриховых линий рассмотрены случаи как двух критических точек (а), так и одной

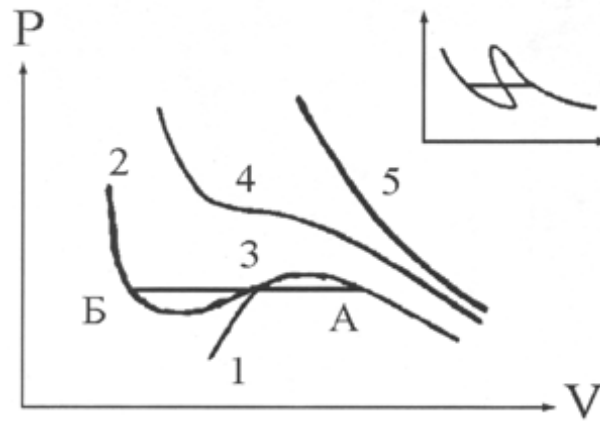


Рис. 6.9: Схематический вид изотерм реальной плазмы согласно [120], [122]. 1 - кривая, следующая из классического рассмотрения (правая часть кривой соответствует дебаевскому приближению, левая - квазикристаллическому), 2, 3 и 4 - возможный вид кривых при учете квантовых эффектов, 5 - зависимость для идеального газа атомов, электронов и ионов. На вставке - возможный вид изотерм 2 и 3 при низких температурах.) [120]

дополнительной тройной точки (б).

Впоследствии приближения, максимально учитывающие все возможные взаимодействия, развивались и применялись для описания термодинамики реальных газов, включая водород, гелий, ксенон, щелочные металлы и др. в широком диапазоне температур и давлений ([116], [192], [120], [191], [274] и др.) В этих приближениях учитывалось как взаимодействие в заряженной подсистеме, так и, с разной степенью точности, взаимодействие нейтральных частиц с заряженными, а также нейтральных частиц друг с другом, включая принципиально важное для случая водорода взаимодействие в молекулярной подсистеме. Результатом такой экстраполяции явилось великое множество предсказанных в литературе вариантов гипотетических ФП с большей или меньшей степенью аномальности в их свойствах (см.рис. 6.11- 6.14). Сегодня гипотетические ФП - это в большинстве своем аномальные фазовые переходы со структурой фазовой границы, имеющей мало общего с обычным переходом типа газ - жидкость.

Общая характеристика существующих предсказаний ПФП

Одной из предпосылок, способствовавших предположениям о существовании особого ФП в системе заряженных частиц, является факт нарушения условия $(\partial\mu/\partial n)_T \geq 0$ (6.16) в дебаевском приближении при экстраполяции его в область параметров $\Gamma \gg 1$ (для однократно заряженной системы ($Z_{\pm} = \pm 1$) при $\Gamma \geq 4$). Развернутой предпосылкой подобного ожидания является неизбежное нарушение условия $(\partial\mu/\partial n)_T \geq 0$ в рамках классической кулоновской системы с неидеальностью, описываемой однопараметрической поправкой в форме $\Delta f(\Gamma)$ (6.85), и одновременно удовлетворяющей неравенству Гиббса-Боголюбова (6.18) (6.85) $\{d \ln |\Delta p|/d \ln \Gamma \geq 2/3\}$ [59], [28].

Развитие подхода к проблеме плазменных фазовых переходов (ПФП) имеет много общего с ситуацией, характерной для теории нейтральных систем. Известно, что теория неидеальных газов, созданная Ван-дер-Ваальсом, может быть построена как фактическая экстраполяция выражения для зависимости давления от плотности, да-

ваемой в пределе малой плотности приближением второго вириального коэффициента, если эффект отталкивания при этой экстраполяции приближенно учесть путем введения исключенного объема молекул. Такой прием оказался весьма плодотворным, и с его помощью удалось качественно воспроизвести ФП газ - жидкость, причем для многих веществ с неплохой точностью.

Вместе с тем полезно подчеркнуть, что асимптотически равновесное приближению второго вириального коэффициента - приближение второго группового коэффициента - в принципе не может воспроизвести "петель" Ван дер Ваальса в УРС ни при каких параметрах [153]. Это иллюстрирует тот факт, что в теоретическом анализе проблемы фазовых переходов сам по себе аппарат асимптотических разложений по параметру неидеальности не является надежной (адекватной) стартовой площадкой. Проблема требует иных методов и других аргументов.

Главным отличительным признаком большинства предсказанных на сегодня плазменных фазовых переходов (ПФП) является тот факт, что заметная их часть носит отчетливые признаки энтропийного фазового перехода, когда хотя бы на части кривой равновесия (как правило, в высокотемпературной области) переход в плотную фазу сопровождается отрицательной теплотой испарения:

$$Q_{\text{исп}} = T(S_{\text{разреж}} - S_{\text{плотн}}) \leq 0. \quad (6.91)$$

Это означает, что в соответствии с уравнением Клапейрона - Клаузиуса, по крайней мере на части фазовой границы ПФП, наблюдается отрицательный наклон части $p(T)$ -линии фазового равновесия:

$$\left(\frac{dp}{dT}\right)_{\text{Sat}} \leq 0 \quad (6.92)$$

С этим свойством ПФП тесно связана другая аномалия - наличие вблизи ПФП областей параметров с аномальным (отрицательным) знаком производной $(\partial p/\partial T)_V$:

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_V \leq 0. \quad (6.93)$$

На рис. 6.11 показано взаиморасположение границ для нескольких вариантов предсказанных ПФП (схематический вид изотерм и границы двухфазной области гипотетического плазменного фазового перехода. Обозначены: - a, c - тройные точки, b, d - критические точки (рис. из работы [116])).

Для большей части из множества предсказываемых вариантов ПФП характерны следующие признаки:

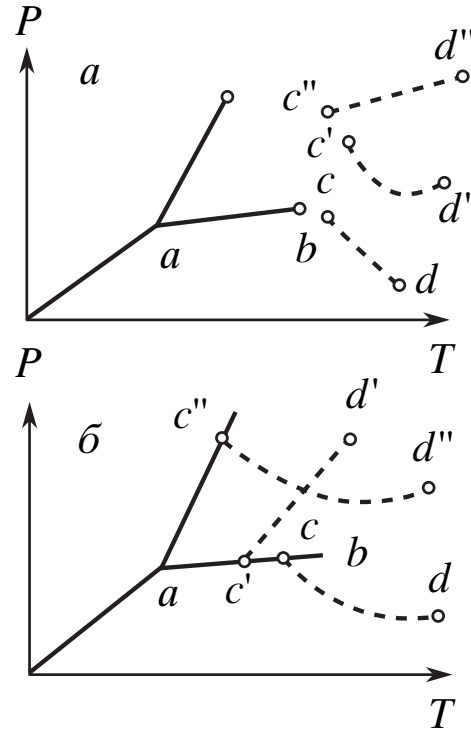


Рис. 6.10: Схема границ гипотетического плазменного фазового перехода [120]

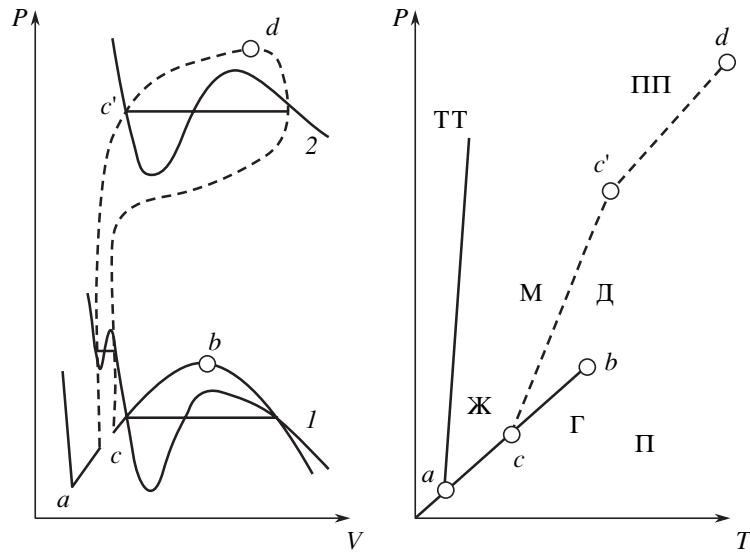


Рис. 6.11: Схема изотерм и границ двухфазной области гипотетического плазменного фазового перехода [116]

1. Наличие участка с отрицательным наклоном кривой равновесия $-p(T)_{Sat}$ и отрицательной теплотой испарения. Критическая точка ПФП, как правило, замыкает снизу падающий высокотемпературный участок зависимости $p(T)_{Sat}$ (см.рис. 6.11- 6.13).
2. Для теоретических предсказаний ПФП характерна возможность существования нескольких переходов, когда качественно близкие ПФП предсказываются на разных кратностях ионизации. Это так, например, для гелия. На рис. 6.12 представлена $p \leftrightarrow T$ диаграмма предсказанная для плазмы гелия в работе [192].
3. Возможность пересечения по крайней мере части двухфазной области по изохоре ($V = const$), что невозможно для обычных ФП переходов газ-жидкость (см. рис. 6.13).
4. Наличие участков с аномальным знаком производной $(\partial p / \partial T)_V$. При условии $C_V \geq 0$ это означает наличие участков с многослойностью термодинамических поверхностей для ряда термодинамических величин, как функций от давления и плотности, например $T(p, V)$ и $U(p, V)$ и др.
5. Наличие при низких температурах типичных участков аномального, возвратного хода изотерм в двухфазной области. Это схематически показано на вставке рис. 6.9 на примере типичной для ПФП S-образной изотермы, приходящей в случае ПФП на смену традиционной форме "петли" Ван дер Ваальса на изотерме в двухфазной области при низких температурах. Кроме того, также при низких температурах для многих посвященных проблеме ПФП работ нередким является предсказание необычной "клювообразной" формы изотермы в районе первой спинодали (кривой, где выполняется условие $(\partial p / \partial V)_T = 0$) в области слабо ионизованной фазы). Типичный пример такой аномалии представлен на рис. 6.14 для гипотетического ПФП в плотной плазме ксенона (см.также [46]).

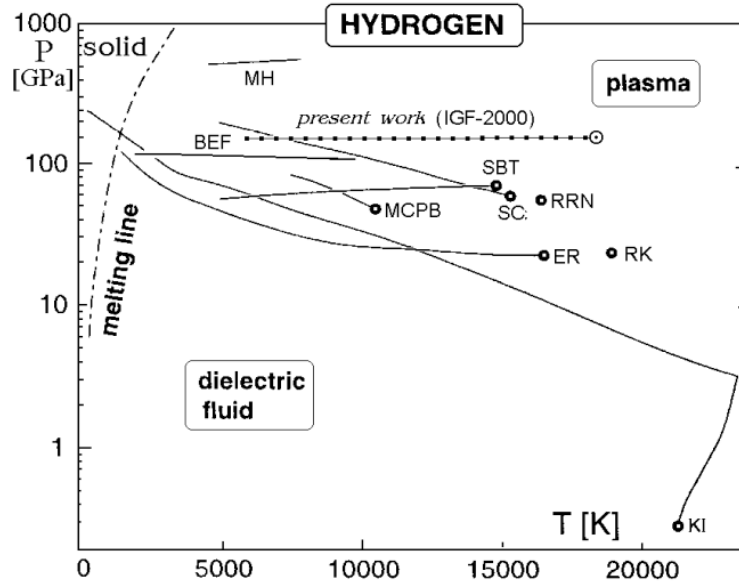


Рис. 6.12: Сводная фазовая $p - T$ диаграмма водорода с различными вариантами теоретически предсказанных "плазменных фазовых переходов" (ПФП). (Рисунок из работы [172]) дополненный результатами [75]). Обозначения: - RK - Robnick & Kundt (1983), ER - Ebeling & Richert (1985), MH - Marley & Hubbard (1988), SC - Saumon & Chabrier (1989), SBT - Schlanges & Bonitz (1995), RRN - Reinholz, Redmer & Nagel (1995), MCPB - Magro, Ceprely, Pierleoni & Bernu (1996), KI - Kitamura & Ichimaru (1998), BEF - Beule, Ebeling & Foerster (1999), IGF - Iosilevski, Gryaznov & Fortov (PNP, Greifswald-2000)

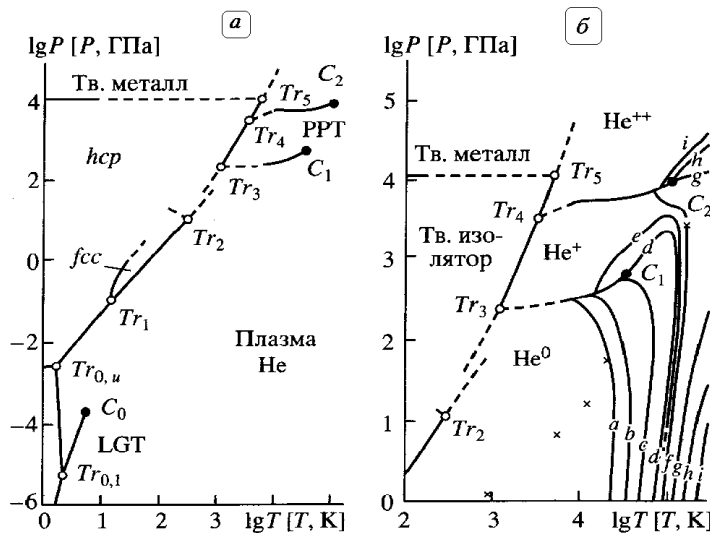


Рис. 6.13: Предполагаемая $p - T$ диаграмма гелия в области двух гипотетических плазменных фазовых переходов [192]). Отмечены: Граница нормального испарения ($Tr_{0,1} - C_0$), Граница нормального плавления ($Tr_{0,1} - Tr_{0,u} - Tr_1$), Границы гипотетического равновесия в 1-м и 2-м ПФП (линии $Tr_3 - C_1$ и $Tr_4 - C_2$), Линии постоянной степени ионизации (среднего заряда иона) а - 0.01, b - 0.1, с - 0.5, d - 0.9, е - 1.0, f - 1.1, g - 1.5, h - 1.9, i - 1.99.

6. Для НТП одного химического элемента со свойством (5) непосредственно связано возможное аномальное взаиморасположение спинодалей ПФП, когда плотность на спинодали "газовой" (слабо ионизованной) фазы может оказаться выше (см.рис. 6.14 и вставку на рис. 6.7) плотности на спинодали фазы сильноионизованной (неидеальной). Если принять во внимание, что при приближении к критической точке сами изотермы и взаиморасположение спинодалей на них принимают стандартный вид, можно придти к выводу о возможности пересечения спинодалей для части из предсказываемых ПФП. Возможные последствия такого пересечения для газодинамических течений или возможности экспериментального исследования ПФП практически не изучены.

Ситуация еще более усложняется для гипотетического ПФП в НТП, представляющей собой активно реагирующую смесь нескольких химических элементов [59], [217], [40]. В этом случае положение спинодали соответствует нарушению условий (6.16). Возможная структура фазовых границ гипотетических ПФП в неидеальной химически активной плазме изучена крайне слабо (см.ниже §6.5.5)

Следует отметить, что несмотря на чрезвычайную множественность вариантов ПФП, предсказанных в литературе примерно за 55 лет с момента публикации статьи Ландау и Зельдовича (1944) и 30 лет со времени публикации обзора Нормана и Старостина [120], большинство публикаций ограничивается сдержанным иллюстрированием свойств предсказываемых ПФП. В частности, практически отсутствует исследование эффекта ПФП в калорическом уравнении состояния, в особенности в усеченном калорическом УРС $U(p, V)$. Такое исследование необходимо для проведения детального анализа возможных гидродинамических эффектов при пересечении ПФП динамическими траекториями, соответствующими ударному сжатию (или возможно ударному разрежению), изоэнтропическому разрежению и др. (см.раздел XI и III.1.6 [160]).

В заключение следует подчеркнуть, что эвристические приближения страдают большой неопределенностью предсказаний и приводят в ряде случаев к качественно различающимся выводам, но вместе с тем эти исследования являются постоянным стимулом для экспериментальных и более строгих теоретических поисков предсказываемых ПФП. (см.подробнее [255], [256], [254], [282], [283]).

В природе своеобразными моделями сильнонеидеальной плазмы, в которых наблюдаются фазовые переходы первого рода и возникновение упорядоченных структур, являются растворы металлов в жидком аммиаке (см.обзор [102]) или пылевая плазма (см. раздел VI.2.3 [160]). Последняя является примером сильновзаимодействующей кулоновской системы, которую можно реализовать в стационарных условиях при умеренных давлениях и низких температурах газа. Высокая степень неидеальности обусловлена большой величиной заряда пылинок ($Z \sim 10^4$ зарядов электрона), входящего в параметр взаимодействия $\Gamma \equiv Z^2 e^2 n_p^{1/3} / kT$, где $n_p^{1/3}$ - плотность микрочастиц, kT - средняя энергия их равновесного поступательного движения (подразумевается, что ансамбль заряженных "пылинок" находится в термодинамическом равновесии. Это обуславливает термодинамический характер реально наблюдаемой кристаллизации пылинок.).

В целом можно заключить, что прогресс в понимании свойств "плазменности" обычных ФП в металлах в настоящее время сдерживаются прежде всего недостатком надежных экспериментальных данных о термодинамике большинства металлов

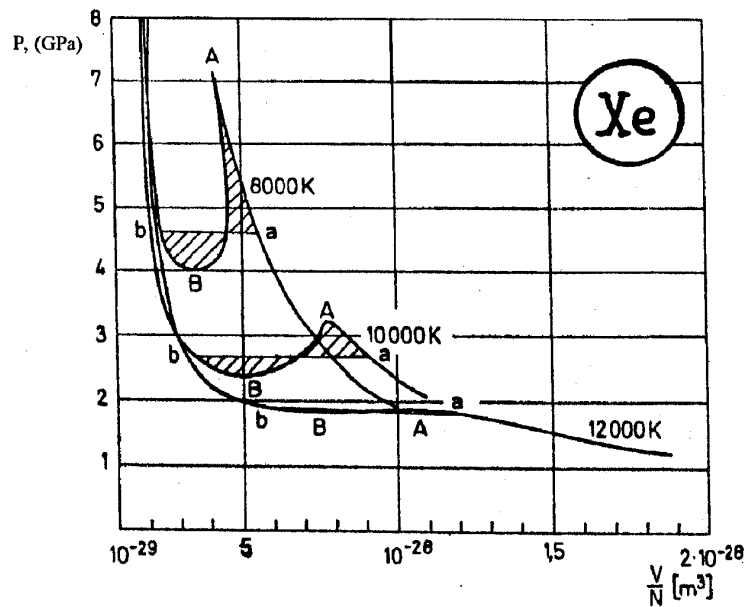


Рис. 6.15: Гипотетический плазменный фазовый переход в плазме ксенона [187]. Аномальные изотермы - при $T < 8000\text{K}$, a,b - границы сосуществующих фаз ПФП (бинодали), A,B - спинодали ПФП ($\partial P/\partial V)_T = 0$)

в районе их критической точки. Особые надежды в связи с этим возлагаются на современные динамические методы генерации и диагностики этих состояний вещества. Это - например техника мощного ударного сжатия с последующим изоэнтропическим расширением ("разгрузкой") в высокотемпературную область фазового перехода в металлах, включая его критическую точку (см. [69]), или же перспективная техника интенсивного объемного квазиизохорического нагрева пористых образцов металла [7].

6.4.3 Электростатика фазовой границы в кулоновских системах

Отличительной особенностью любой локальной неоднородности ("слоя") в термодинамически равновесной системе частиц с кулоновским взаимодействием является существование конечной разности потенциалов по обе стороны этой неоднородности ("слоя"). Это справедливо прежде всего в отношении любой межфазной границы в такой системе (кристал-флюид, флюид-флюид и др. [214], [218]). Как уже отмечалось выше, термодинамическое равновесие в системе кулоновских частиц имеет ряд черт, принципиально отличающих его от равновесия в системах с короткодействием. Одним из главных отличий этого рода является то, что средний потенциал в кулоновской системе приобретает существенные элементы нелокальности. Следствием этого является то, что такие же черты нелокальности приобретает и (раздельный) химический потенциал каждой из заряженных компонент системы, который в случае кулоновской системы расщепляется на два различных объекта - наблюдаемый, но в общем случае нелокальный электрохимический потенциал $\tilde{\mu}_i$ (ЭХП), и допускающий определение в случае однородной системы - локальный химический потенциал μ_i (ХП), связанный в этом случае с ЭХП простым соотношением (Гугенхейм, 1939

[42]), [2], [4]

$$\tilde{\mu}_i = \mu_i + Z_i e \varphi \quad (\varphi = \text{const} - \text{средний потенциал в системе}). \quad (6.94)$$

В случае фазовой границы, разделяющей две однородные фазы, средний потенциал в каждой из них в общем случае различен, и разность этих потенциалов непосредственно связана с поведением ХП и ЭХП в процессе фазового равновесия.

Существование потенциала межфазной границы в кулоновских системах есть проявление асимметрии в равновесных свойствах различных сортов зарядов в сосуществующих фазах (в первую очередь, конденсированной) [214], [70]. Высокая величина этого потенциала характерна для резко несимметричных систем. При этом знак потенциала фазовой границы отражает эту асимметрию. Так в металлах потенциал границы газ-жидкость и газ-кристал всегда отрицателен (выше в конденсированном состоянии). Знак же потенциала границы плавления неоднозначен и зависит от доминирующего механизма связи в кристалле и жидкости. То же относится и к полиморфным переходам.

В то же время потенциал $\Delta\varphi$ тождественно равен нулю в полностью симметричных системах, например, в случае перехода газ-жидкость в электрон-позитронной плазме, или при плавлении и переходе газ-жидкость в т.наз. "примитивной модели электролита" (см.напр. [19], [236]) - классической системе равно-, но противоположно-заряженных твердых сфер одного радиуса. Обсуждаемое равенство нулю потенциала фазовой границы в симметричных кулоновских системах иллюстрирует, в частности, различие между обсуждаемым потенциалом и другой электрофизической характеристикой низкотемпературного конденсированного состояния - работой выхода W_e . Последняя вовсе не равна нулю для симметричных систем.

Особенности условий фазового равновесия в кулоновских системах

В случае, если фазовая граница в кулоновской системе (в отсутствии внешнего поля) допускает свободный обмен зарядами, условия межфазного равновесия, помимо равенства температуры и давления требуют равенства электрохимических потенциалов $\tilde{\mu}_i$. Химические же (локальные) потенциалы заряженных компонент, определенные соотношением (6.101), в общем случае не обязаны быть равными.

$$T' = T'' \quad p' = p'', \quad (6.95)$$

$$\tilde{\mu}'_i = \tilde{\mu}''_i = \text{const}, \quad (6.96)$$

$$\mu'_i \neq \mu''_i \neq \text{const}, \quad (6.97)$$

В случае, если обе сосуществующие фазы являются в глубине каждой из них однородными, то есть выполняется

$$\varphi(r) \rightarrow \varphi'(r \rightarrow -\infty) \equiv \varphi' \quad \varphi(r) \rightarrow \varphi''(r \rightarrow +\infty) \equiv \varphi'', \quad (6.98)$$

то равенство электрохимических потенциалов для каждого сорта зарядов по обе стороны неоднородности ведет к появлению конечной разности потенциалов между фазами [214].

$$\mu'_i + Z_i e \varphi'(r \rightarrow -\infty) = \mu''_i + Z_i e \varphi''(r \rightarrow +\infty), \quad (6.99)$$

$$\mu'_e - e \varphi'(r \rightarrow -\infty) = \mu''_e - e \varphi''(r \rightarrow +\infty). \quad (6.100)$$

Появление в (6.99) и (6.100) величины $\Delta\varphi$ (дополнительной степени свободы) $\Delta\varphi \equiv \varphi'(r \rightarrow -\infty) - \varphi''(r \rightarrow +\infty)$ не вносит неоднозначности в условия фазового равновесия, поскольку в плазме в каждой из фаз появляется дополнительное условие электронейтральности ($\sum n_i Z_i = n_e$), отсутствующее в случае равновесия некулоновских систем.

Химический и электрохимический потенциалы различаются только для заряженных компонент. Условия фазового равновесия по межфазному обмену для любой нейтральной компоненты (атома, молекулы и др.) а также для любой электронейтральной комбинации заряженных частиц, не различаются в кулоновских и некулоновских системах

$$\tilde{\mu}'_i = \mu'_i = \tilde{\mu}''_i = \mu''_i \quad (Z_i = 0), \quad (6.101)$$

$$Z_i \tilde{\mu}'_i + \tilde{\mu}'_e = Z_i \mu'_i + \mu'_e = Z_i \tilde{\mu}''_i + \tilde{\mu}''_e = Z_i \mu''_i + \mu''_e. \quad (6.102)$$

Термодинамический характер потенциала фазовой границы в кулоновской системе

В случае, если две (три и т.д.) сосуществующие фазы являются однородными средний потенциал φ в каждой из них считается постоянным, и локальный химический потенциал, определенный согласно (6.101) также постоянен. Считается, что все элементы нелокальности термодинамического равновесия в каждой из фаз (т.е. зависимости предельных ($V \rightarrow \infty$) удельных величин помимо средней плотности, температуры и химической пропорции составляющих еще и дополнительно от таких факторов, как форма сосуда, свойства границ системы и т.д.) в этом случае исчерпываются величиной среднего потенциала φ , так что химический потенциал (6.101) в каждой из фаз считается локальной величиной

$$\mu = \mu(\mathbf{n}, T). \quad (6.103)$$

В этом случае и потенциал межфазной границы $\Delta\varphi$ (6.98)-(6.100) определяется только равновесными свойствами обеих фаз и является чисто термодинамической величиной, зависящей в силу (6.102)(6.103) лишь от температуры, и не зависящей, например, от свойств поверхности [214].

$$\begin{aligned} \varphi &\equiv \varphi'(r \rightarrow -\infty) - \varphi''(r \rightarrow +\infty) = \varphi'(\mathbf{n}', T) - \varphi''(\mathbf{n}'', T) = \\ &= e^{-1}[\mu_e(\mathbf{n}'', T) - \mu_e(\mathbf{n}', T)] = (Ze)^{-1}[\mu_i(\mathbf{n}, T) - \mu_i \mathbf{n}'', T)] = \varphi(T). \end{aligned} \quad (6.104)$$

Термодинамический характер потенциала фазовой границы, как функции только от температуры выводит на передний план две характеризующих эту зависимость предельные величины: - потенциал границы в пределе $T \rightarrow 0$ и тот же потенциал при приближении к критической точке (если она есть). Величина потенциала пределе $T \rightarrow 0$ по своему характеру является электрофизической постоянной вещества, дополняющей известный набор индивидуальных термо- и электрохимических констант, таких как теплота сублимации, потенциал ионизации, работа выхода и др. [218].

Кроме того термодинамический характер потенциала фазовой границы в интервале между $T = 0$ и $T = T_C$ делает содержательным вопрос о возможности непосредственного измерения этой величины. В низкотемпературной электрофизике известно [42], [2], [4] что при частично или полностью равновесном контакте двух веществ проблема измеримости, как отдельного потенциала каждого из

контактантов, так и так называемой "контактной разности потенциалов", не является тривиальной. Близкая к вышеупомянутой, но не эквивалентная ей, проблема потенциала фазовой границы в плазме имеет свою специфику, связанную как с наличием полного термодинамического равновесия между фазами (а не равновесия только по обмену электронами, как это имеет место в большинстве приложений низкотемпературной электрофизики), так и с более существенной ролью, которую играет в этой проблеме газовая фаза (в сравнении с вакуумом при $T = 0$) в силу конечности температуры .

Потенциал границы газ-конденсированное состояние в пределе нулевой температуры

В этом пределе плотность также стремится к нулю. Как уже отмечалось (§6.1) состояние $T \rightarrow 0$, $n \rightarrow 0$ является особой точкой термодинамического равновесия (часть термодинамических величин в этом пределе зависит от способа перехода к пределу ($\text{Lim}_{n \rightarrow 0}[\text{Lim}_{T \rightarrow 0}] \neq \text{Lim}_{T \rightarrow 0}[\text{Lim}_{n \rightarrow 0}]$). Ниже всюду в этом разделе рассматривается только переход к пределу $T = 0$ и $n = 0$ вдоль кривой сосуществования газ - конденсированное состояние. Это существенно отличает данное рассмотрение от традиционного анализа механизма работы выхода на границе конденсированное состояние - вакуум при $T \sim 0$ [218].

В пределе $T \rightarrow 0$ пары идеальны. Химический потенциал ионов и электронов задается известным выражением $\mu_k \sim kT \ln\{n_k \Lambda_k^3\}$. В сочетании с условием электронейтральности это приводит к соотношению

$$\text{Lim}\{\mu_i(T) - \mu_e(T)\}_{T \rightarrow 0} = 0 \quad \{\mu_i(0) = \mu_e(0)\}, \quad (6.105)$$

(за нуль отсчета $\mu_i(T)$ и $\mu_e(T)$ принято состояние идеального газа при $T = 0$)

В пределе $T \rightarrow 0$ химический потенциал любой нейтральной частица (атома, молекулы и др.) находящейся в равновесии с конденсированным состоянием, стремится к пределу, непосредственно связанному с теплотой сублимации при $T = 0$ - табличной характеристикой вещества. Дальнейшие утверждение о поведении величины $\varphi(0)$ существенно зависят от того, какие сорта частиц, заряженных и нейтральных, являются доминирующими в составе насыщенных паров в обсуждаемом пределе $T \rightarrow 0$. Величина $\Delta\varphi(T = 0)$ непосредственно выражается через теплоту сублимации вещества - $\Delta_s H^0$, энергию реакции ионизации нейтральной доминанты газовой фазы - I , и химический потенциал одной из заряженных доминант газовой фазы в фазе конденсированной [218].

Одним из примеров такой ситуации является равновесие газ-жидкость в металлах. В этом случае нейтральной доминантой газовой фазы являются атомы, а заряженными доминантами - однократные ионы и электроны (см. §7.1). Условие электронейтральности паров (и его следствие при $T \rightarrow 0$ (6.105)) совместно с условием равновесности реакций ионизации в обеих фазах (уравнением САХА - для газовой фазы) приводит в пределе $T \rightarrow 0$ к соотношению (6.108), если в качестве химического потенциала электрона $[\mu_e(T)]_{liq}$. принять величину работы выхода (при $T = 0$) - W_e .

$$\mu_e(T) + \mu_i(T) = \mu_a(T) \equiv \mu_a^0(T) - I_1 \quad (gas), \quad (6.106)$$

$$\mu_e(T) + \mu_i(T) = \mu_a(T) \implies \mu_a(0) = -(\Delta_s H^0) - I_1 \quad (liquid), \quad (6.107)$$

$$e\Delta\varphi(T) = [\mu_e(T)]_{liq} - [\mu_e(T)]_{gas} \implies [\mu_e(0)]_{liq} + \frac{[\mu_a(0) + I]}{2} = \frac{(\Delta_s H^0 + I)}{2} - W_e. \quad (6.108)$$

Существенно, что соотношение (6.108) остается справедливым и для металлов, являющихся в жидкой фазе многократно ионизованными (Al^{+3} , Cu^{+2} и др.) [70].

В химически реагирующих ионных системах поведение потенциала межфазной границы заметно усложняется. Это в особенности относится к т.наз. высоко-ионным системам [204]. Оно становится взаимозависимым с особенностями параллельно протекающих химических реакций. В общем случае такое фазовое равновесие является неконгруэнтным, то-есть минимуму свободной энергии в химически реагирующих системах может в общем случае отвечать сосуществование фаз с различающейся стехиометрией (дополнительная степень свободы), при сохранении заданной общей стехиометрии двухфазной смеси (брутто-состава). Так в случае равновесия жидкого (или твердого) диоксида урана (UO_2) с его парами неконгруэнтность этого испарения связывает воедино свойства обсуждаемого потенциала межфазной границы - $\Delta\varphi$, с поведением играющего принципиальную роль при описании этой неконгруэнтности т.наз. кислородного потенциала - важной характеристики конденсированного состояния UO_2 [286], [217]

Более известным примером неконгруэнтного фазового равновесия в многокомпонентных системах (включая химически реагирующие) является равновесие кристалл-жидкость (солидус-ликвидус). В затронутом примере важного в прикладном отношении компаунда, диоксида урана (UO_2) (являющегося штатным топливом в ядерной энергетике) связь потенциала границы солидус-ликвидус с остальными характеристиками этой границы может дать, будучи измеренной, важную дополнительную информацию об электрофизических аспектах обеих фаз: - твердой, считающейся высокоионным кристаллом ($U^{+4} + O^{-2}$), и жидкой, для которой вопрос о преобладании ионной либо квази-молекулярной структуры для которой, является по сей день открытой [204], [202], [217].

Потенциал границы газ-жидкость в окрестности критической точки в кулоновской системе

В силу термодинамического характера потенциала межфазной границы (φ) в кулоновских системах, величина этого потенциала обязана стремиться к нулю в критической точке фазового перехода газ-жидкость в силу исчезновения термодинамического различия газа и жидкости [214]. Следствием является то обстоятельство, что характер этого стремления при $T \rightarrow T_C$ может быть описан введением дополнительного критического индекса - ϕ [70], [218]

$$\Delta\varphi(T) \sim |T - T_C|^\phi \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow T_C). \quad (6.109)$$

Если предположить, что отдельные химические потенциалы заряженных компонент, μ_i , в окрестности критической точки являются регулярными функциями своих параметров - \mathbf{n} и T , то можно прийти к выводу, что обсуждаемый дополнительный критический индекс - ϕ совпадает с другим критическим индексом - β , характеризующим характер сближения при $T \rightarrow T_C$ плотностей жидкой и газовой фаз [218].

$$\Delta\rho(T) \sim |T - T_C|^\beta \rightarrow 0 \quad (T \rightarrow T_C), \quad (6.110)$$

$$\phi = \beta \quad (6.111)$$

Такое гипотетическое совпадение индексов ϕ и β делает содержательным вопрос о возможности измерения индекса ϕ (вместо измерения β) как в прямом, так и в "чис-

ленном" эксперименте, учитывая то обстоятельство, что измерение (или моделирование) среднего потенциала каждой из фаз может оказаться более реалистичным, нежели измерение характера поведения исчезающей при $T \rightarrow T_C$ разности плотностей [70]. Вопрос о реальном измерении величины φ остается вне рамок настоящего обсуждения. Что же касается численного моделирования обсуждаемого потенциала межфазной границы, то здесь в силу прямой вычислимости среднего потенциала $\varphi(\mathbf{r})$

$$\varphi(\mathbf{r}) \equiv \langle \sum n_i(\mathbf{r}') V_{Coul}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d\mathbf{r}' \rangle$$

не видно никаких препятствий, кроме повышения "мощности" используемых реализаций методов Монте-Карло и Молекулярной Динамики (число частиц, длина цепочек, стабилизации "зародышей" (см. подробнее [281]), так чтобы "численный эксперимент" реально моделировал одновременное сосуществование двух (трех и т.д.) фаз. Примеры такого моделирования для некулоновских систем с короткодействием (модель твердых шаров) уже реализованы. Логичным продолжением этой линии было бы моделирование фазового сосуществования для какой-либо идеализированной кулоновской системы.

Наконец, вся обсуждавшаяся выше проблематика потенциала межфазной границы в кулоновских системах в полной мере, и даже возможно с еще большей степенью актуальности, относится к особому и крайне популярному в физике неидеальной плазмы объекту - гипотетическим "плазменным" фазовым переходам ПФП. Не только величина и характер поведения вблизи критической точки, но и знак, и даже сам факт существования потенциала межфазной границы в ПФП, не привлекал до сего времени пристального внимания исследователей. Сказанное в особой мере относится к гипотетическому фазовому расслоению в плотной гелий-водородной плазме астрофизических объектов, таких как недра звезд-гигантов (Юпитер, Сатурн и др. [287], [209].) Плазменность и многокомпонентность этого фазового перехода роднит проблематику потенциала фазовой границы в нем с аналогичной "интерференцией" плазменных аспектов фазового равновесия в кулоновской системе с неконгруэнтностью фазового равновесия, характерной для фазовых переходов в химических соединениях, таких как диоксид урана (UO_2) и др. [217].

Иллюстрации и приложения

Свойства потенциала межфазной границы иллюстрируются на примере упрощенных кулоновских моделей. Простейшей приложением является модель однокомпонентной плазмы на однородном компенсирующем фоне (One-Component Plasma - OCP). Свойства модели хорошо изучены в ее стандартном варианте с однородным несжимаемым фоном - OCP(r) [171], [211], [186], [212]. (значок "r" (rigid) подчеркивает это свойство фона). Единственным фазовым переходом в модели является (вигнеровская) кристаллизация. Она происходит без изменения плотности ($n_{fluid}^* \equiv n_{crystal}^*$). Фазовое равновесие в этих условиях соответствует равенству удельных свободных энергий Гельмгольца обеих фаз (ниже везде используется значок " * ").

$$[f(n^*, T)]_{fluid} = [f(n^*, T)]_{crystal}. \quad (6.112)$$

Хорошо известным свойством кристаллизации в OCP(r) является неравенство в точке перехода формально вычисленных давлений в обеих фазах. Помимо этого свободная энергия $f(n, T)$ не является вогнутой функцией плотности n (см. (6.4) в §7.3.1)

в точке $n = n^*$, что делает неприменимым известное правило "двойной касательной", традиционно используемое в стандартной процедуре нахождения плотностей сосуществующих фаз. В работе С.М.Стишова [132] обосновывается утверждение, что в силу указанных обстоятельств вигнеровская кристаллизация в ОСР(r) не является полноценным фазовым переходом, а лишь "виртуальным" его вариантом. В этой работе также отмечается, что указанные противоречия снимаются, а кристаллизация становится полноценным переходом при переходе к более реалистичному варианту модели - ОСР на однородно сжимаемом фоне, например, идеального электронного газа, ниже обозначаемом как ОСР(c) ("c" - compressible).

Следует подчеркнуть, что в действительности не только давление, но и значения стандартно определенного химического потенциала $\mu = [\partial f(n, T)/\partial n]_T$ не равны в сосуществующих фазах ОСР(r). Однако, как подчеркивалось в [71], [218], все это не означает механической или диффузионной неустойчивости кристаллизации в ОСР(r). Все противоречия снимаются, если принять во внимание обсуждаемое здесь существование скачка потенциала на границе кристалл-флюид [214], и равенство электрохимических, а не химических потенциалов фаз (6.99). Возникающий на этой границе двойной электрический слой ("приповерхностный диполь") создает среднее поле, в точности компенсирующее согласно (6.99) разницу в давлениях и химических потенциалах.

$$\Delta\varphi \equiv \varphi_{crystal}^* - \varphi_{fluid}^* = -(Ze)^{-1}\Delta\mu^* \equiv -(Ze)^{-1}(\mu_{crystal}^* - \mu_{fluid}^*). \quad (6.113)$$

Потенциал границы плавления вигнеровского кристалла

Как известно, границу плавления вигнеровского кристалла в ОСР(r) можно условно разбить на три части [82] (см.напр.рис.1 [222] и рис.6 [66], также [244], [180], [222], [178]):

1. Зона плавления классической (невырожденной) системы ионов относительно низкой плотности. При $T \rightarrow 0$ граница плавления примерно соответствует линии $\Gamma = const \approx 175$ (Γ - классический параметр неидеальности - $\Gamma \equiv (Ze)^2/kTa = const, \{a \equiv (3/4\pi n)^{1/3}\}$) [281],
2. Зона "холодного" (квантового) плавления сильно вырожденной системы ионов высокой плотности [82], [244]. Актуальна для астрофизических объектов (см.например [156]). При $T \rightarrow 0$ граница плавления примерно соответствует линии $r_S \cong const$, (r_S - квантовый параметр неидеальности, $r_S \equiv a/a_0$, a_0 - борровский радиус)
3. Зона перехода между двумя режимами, содержащая примечательную псевдокритическую точку - точку максимума температуры на кривой плавления, T_{max}^{**}

Поведение потенциала межфазной границы плавления вигнеровского кристалла существенно различно для всех трех зон [218]:

1. Классическое плавление в ОСР(r) - ($\theta^{(i)} \equiv k_B T/\varepsilon_F^{(i)} \gg 1$) $\leftrightarrow \Gamma = \Gamma_m \cong 175$ [281]. В этом случае $\mu(\Gamma_m)_{crystal} < \mu(\Gamma_m)_{fluid} < 0$. Соответственно, на межфазной границе потенциал кристалла выше потенциала жидкости (+-). Учитывая однопараметричность всех безразмерных термодинамических функций в этом

пределе, можно выразить величину скачка потенциала через энтропию плавления, $\Delta S_{melting}$

$$Ze\Delta\varphi_{melting} = [\mu''_i(\Gamma_m) - \mu'_i(\Gamma_m)] = kT \left(\frac{\Delta S}{3Nk} \right)_{melting} \cong 0.27kT$$

$$\left\{ \left(\frac{\Delta S^*}{k_B} \right)_{melting} \approx 0.82 \right\} [253]. \quad (6.114)$$

2. "Холодное" (квантовое) плавление в ОСР(r) - ($\theta^{(i)} \equiv k_B T / \varepsilon_F^{(i)} \gg 1$) $\leftrightarrow r_S = (r_S)_m \cong 100$ [178]. В этом случае $0 > \mu\{(r_S)_m\}_{Crystal} > \mu\{(r_S)_m\}_{Fluid}$. Соответственно, на межфазной границе потенциал кристалла ниже потенциала жидкости (-+). Используя результаты Serperley and Alder [178] (квантовый вариант метода Монте-Карло) можно грубо оценить величину $(\Delta\mu)_{melting}$ и соответственно потенциала границы плавления при $T \rightarrow 0$

$$(\Delta\varphi)_{melting} = \frac{(\Delta\mu)_{melting}}{(Ze)} \approx -0.2..V \quad (T \rightarrow 0). \quad (6.115)$$

3. Переходная зона максимальной температуры плавления в ОСР(r) $T^{**} \equiv \max(T_{melt}) \approx (3 \div 10)10^{-5} Ry$ [82], [244], [180], [222]. В этой точке (T^{**}, n^{**}) равновесию кристалл-жидкость соответствуют следующие особые условия [218]:

$$(F^{**})_{Crystal} = (F^{**})_{Fluid} \quad (p^{**})_{Crystal} = (p^{**})_{Fluid} \quad (\mu^{**})_{Crystal} = (\mu^{**})_{Fluid}. \quad (6.116)$$

В соответствии с этим потенциал границы плавления в точке $\{T^{**}, n^{**}\}$ в точности равен нулю.

$$(\Delta\varphi^{**})_{melting} = 0. \quad (6.117)$$

Консолидируя все три части потенциала границы плавления вигнеровского кристалла, $\Delta\varphi_{melting}(T)$, можно построить объединенный электростатический "портрет" этой границы плавления, представленный (полуколичественно) на рис. ??.

Электростатика межфазных границ в безассоциативных моделях плазмы

В этих вариантах семейства безассоциативных моделей плазмы [66] используется более реалистичное допущение о компенсирующем фоне, как однородном, и вместе с тем сжимаемом флюиде (это обозначается значком "с") с собственным уравнением состояния. Для ОКП ионов в качестве фона используется идеальный ферми-газ электронов. Главное следствие отсутствия комплексообразования в модели - аддитивность итогового уравнения состояния, составленного из уравнений состояния однокомпонентной системы ионов ОСР(r) и электронов. Это позволяет проводить до конца вычисления свойства всех фазовых переходов в системе [66]. Кристаллизация в модели ОСР(c) рассматривалась в [253]. Полная фазовая диаграмма этой модели и всего семейства безассоциативных моделей детально исследовалась в [66], [214], [215], [216], [218].

С точки зрения фазовых переходов однородная сжимаемость компенсирующего фона электронов приводит к двум последствиям: - появлению конечного скачка плотности при плавлении [253] и к дополнительному появлению в пределе малых

плотностей обширного фазового перехода 1-го рода флюид-флюид с верхней критической точкой [66]. При этом условия фазового равновесия в модели $ОСР(c)$ имеют стандартный вид, аналогичный общим условиям в любой кулоновской системе (см. выше). В частности, для границы плавления выполняется:

$$[p^{(+)} + p^{(-)}]_{Crystal} = [p^{(+)} + p^{(-)}]_{Fluid} \quad [\mu^{(+)} + Z\mu^{(-)}]_{Crystal} = [\mu^{(+)} + Z\mu^{(-)}]_{Fluid}. \quad (6.118)$$

$$[n^{(+)} + Zn^{(-)}]_{Crystal} = [n^{(+)} + Zn^{(-)}]_{Fluid} = 0.$$

(Символами $X^{(+)}$ и $X^{(-)}$ обозначены вклады подсистемы ионов и компенсирующего фона, соответственно. Возможно и обратная комбинация - используемая в упрощенной теории металлов - квантовый (коррелирующий) электронный газ на фоне идеального газа ионов). Следует подчеркнуть, что значения химического потенциала как ионов, так и электронов в сосуществующих фазах $ОСР(c)$ по-прежнему остаются не равны.

$$[\mu^{(+)}]_{Fluid} \neq [\mu^{(+)}]_{Crystal} \quad [\mu^{(-)}]_{Fluid} \neq [\mu^{(-)}]_{Crystal}. \quad (6.119)$$

Вместе с тем значения электрохимических потенциалов как ионов, так и электронов в сосуществующих фазах обязаны согласно (6.99)(6.100) быть равными. Факт наличия скачка потенциала на всех фазовых границах в $ОСР(c)$ исследовался в [214], [215], [216], [218]. Для случая классических зарядов ($Z = +1$) на фоне идеального ферми-газа электронов зависимость $\Delta\varphi(T) = [\mu^{(+)}]_{Phase-I} - [\mu^{(+)}]_{Phase-II}$ вычислена в работе [214] как для плавления, так и для испарения и сублимации. Для модели, являющейся двухкомпонентным аналогом $ОСР(c)$ - суперпозиции двух $ОСР$, ионов и электронов ("Сдвоенная" модель $ОСР$ [66]) величина $\Delta\varphi(T)$ рассчитана в [215]. Обе кривые приведены на рис. 6.17 в зависимости от приведенной температуры. (На вставке - скачок потенциала на границе плавления вигнеровского кристалла в обеих моделях). Примечательно высокое значение предельной величины скачка $\Delta\varphi(T = 0)$ в

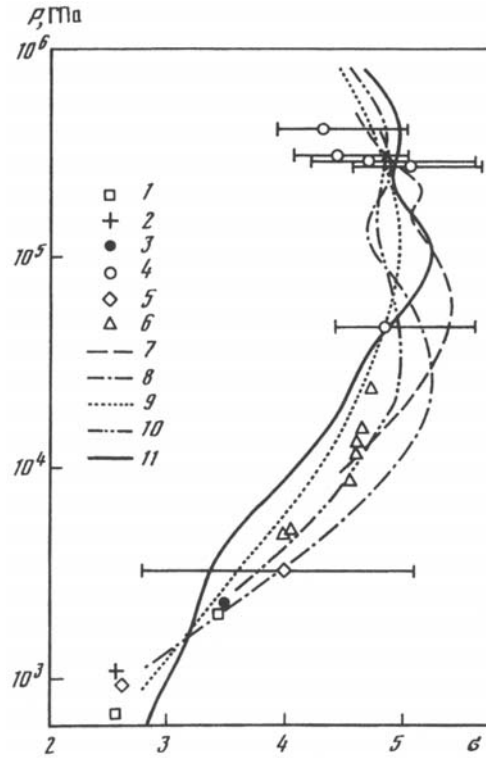


Рис. 6.16: Потенциал межфазной границы плавления вигнеровского кристалла [1 ÷ 4 - $ОСР(r)$, 5, 6 - $ОСР(c)$] [218] 1 - НКС ионов ($\Gamma \equiv (Ze)^2/kTa \approx 178$ [281]), 2 - квант. плавление СВС ионов ($r_s \equiv a/a_0 \approx 100$ [178]), 3 - переходная зона между режимами плавления 1 и 2, 4 - T_{max}^{**} - макс. температура плавления [222], 5 - плавление НКС ионов с $Z = 2$ на компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов, 6 - То же что и 5 в пределе низкой плотности (однородный фон электронов). (1, 5 и 6 - [66], [215], [216], [218], 2 - оценка с использованием [178], 3 - предполагаемое поведение.

сравнении с критической температурой перехода газ-жидкость в модели $\{(kT_c)_{OCP} \cong 0.65eV [66]\}$. Примечательно также, что скачок потенциала в модели DOCP, где учтены корреляции как ионов, так и электронов, выше, чем в модели OCP(c) [215].

$$(a) \frac{e\Delta\varphi(T=0)}{kT_C} \cong 17 \Leftrightarrow (b) \frac{e\Delta\varphi(T=0)}{kT_C} \cong 10.5,$$

В свою очередь скачок потенциала в модели со сжимаемым фоном (OCP(c) на рис. 6.7) выше, чем в варианте модели с несжимаемым ("замороженным") фоном (OCP(r) на рис. 6.17).

Помимо температуры потенциал межфазной границы в обсуждаемых безассоциативных моделях плазмы [215] зависит от величины заряда ионов - Z . Величина потенциала $\Delta\varphi(T, Z)$ растет с увеличением Z . При низких значениях Z поведение $\varphi(T, Z)$ подобно случаю ($Z = +1$), представленному на рис. 6.17. Критический индекс зависимости $\Delta\varphi(T, Z)$ при $T \rightarrow T_C$ совпадает с Ван дер Ваальсовским индексом β в зависимости $\Delta\rho(T)$: $\varphi(T, Z) \sim |T - T_C|^{1/2}$. Поведение $\Delta\varphi(T, Z)$ становится аномальным при высоких значениях величины заряда Z . В особенности это относится к специфическому промежуточному интервалу значений заряда - $35 \cong Z_1^* \leq Z \leq Z_2^* \cong 45$, когда фазовая диаграмма модели в модели OCP(c) приобретает аномальный характер [66], [216] с единым фазовым переходом кристалл-флюид, являющимся непрерывной суперпозицией сублимации и плавления. Поведение зависимости $\Delta\varphi(T, Z)$ отражает эту аномалию. Примечательно поведение этой величины на границах обсуждаемого интервала: - $Z = Z_1^*$ и $Z = Z_2^*$. В появляющейся при этом "псевдокритической" точке $\{\partial p/\partial V = 0, \partial^2 p/\partial V^2 = 0\}$ меняется критический индекс как в зависимости $\rho(T)$ при $T \rightarrow T_C$, так и в зависимости $\Delta\varphi(T, Z)$, с $\beta = 1/2$ на $\beta = 1/3$ [216]. В качестве иллюстрации на рис. 6.18 приведена рассчитанная в [214] зависимость скачка потенциала $\Delta\varphi(T, Z)$ на межфазной границе перехода кристалл-флюид в модели OCP(c) для нижней границы аномального коридора значений заряда иона - $Z = Z_1^* \cong 34.4$ [214]. Примечательно чрезвычайно высокая величина предельного скачка потенциала $\Delta\varphi(T, Z_1^*)$ при $T \rightarrow 0$, иллюстрирующая крайнюю степень асимметрии термодинамики ионов и электронов в конденсированном состоянии рассматриваемой модельной ситуации.

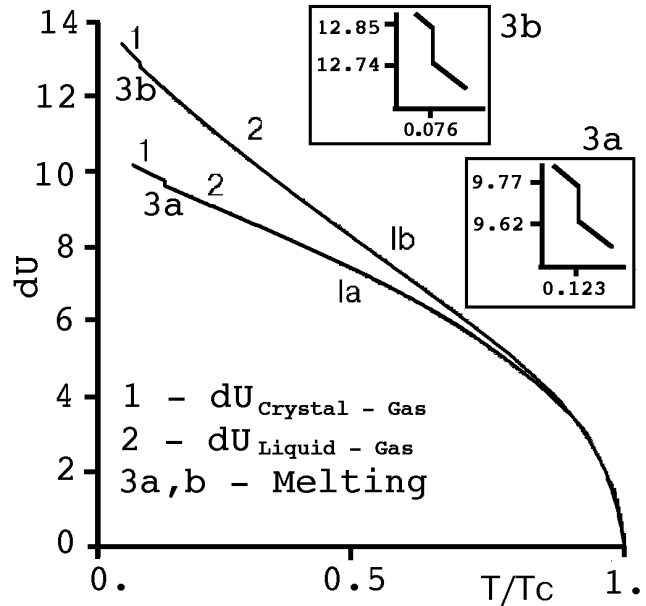


Рис. 6.17: Потенциал межфазной границы ($\Delta\varphi \equiv \varphi_{condens} - \varphi_{gas}$) в безассоциативных моделях плазмы [214], [215], [218]: (a) - модель классических ионов ($z = +1$) на фоне идеального ферми-газа электронов OCP(c), (b) - "Сдвоенная" модель OCP ("Double OCP" [66]). Суперпозиция OCP ионов и электронов. 1 - граница кристалл-газ, 2 - граница газ-жидкость, 3 - граница кристалл-жидкость (на вставках) [215]

В модели OCP(c) приобретает аномальный характер [66], [216] с единым фазовым переходом кристалл-флюид, являющимся непрерывной суперпозицией сублимации и плавления. Поведение зависимости $\Delta\varphi(T, Z)$ отражает эту аномалию. Примечательно поведение этой величины на границах обсуждаемого интервала: - $Z = Z_1^*$ и $Z = Z_2^*$. В появляющейся при этом "псевдокритической" точке $\{\partial p/\partial V = 0, \partial^2 p/\partial V^2 = 0\}$ меняется критический индекс как в зависимости $\rho(T)$ при $T \rightarrow T_C$, так и в зависимости $\Delta\varphi(T, Z)$, с $\beta = 1/2$ на $\beta = 1/3$ [216]. В качестве иллюстрации на рис. 6.18 приведена рассчитанная в [214] зависимость скачка потенциала $\Delta\varphi(T, Z)$ на межфазной границе перехода кристалл-флюид в модели OCP(c) для нижней границы аномального коридора значений заряда иона - $Z = Z_1^* \cong 34.4$ [214]. Примечательно чрезвычайно высокая величина предельного скачка потенциала $\Delta\varphi(T, Z_1^*)$ при $T \rightarrow 0$, иллюстрирующая крайнюю степень асимметрии термодинамики ионов и электронов в конденсированном состоянии рассматриваемой модельной ситуации.

Металл	Cs	Li	W	U	Pb	Hg
$\Delta\varphi, V$	0.54	1.13	3.89	2.49	0.73	3.27

Равновесный электрический потенциал металлической частицы в пылевой плазме

Ионизационное равновесие в низкотемпературной и термодинамически равновесной плазме с частицами конденсированной дисперсной фазы ("пылевой плазме" [160] "КДФ-плазме" [47]) существенно зависит от эмиссионных свойств КДФ-частицы. Эти свойства в первую очередь определяются двумя величинами - химическими потенциалами электронов и ионов μ_{ep} и μ_{ip} . В случае, когда КДФ-частица находится в термодинамическом равновесии с собственным паром, она заряжается до вполне определенного потенциала - $\Delta\varphi$, однозначно определяемого условием электронейтральности пара. В общем случае этот потенциал зависит от размера - L , формы - $\{\diamond\}$, концентрации частиц - n_p , а также от температуры - T . Для достаточно крупных и достаточно удаленных друг от друга частиц потенциал приближается к ограничивающей его сверху предельной величине $\Delta\varphi^*$, зависящей лишь от материала частицы и соответствующей предельному случаю плоской поверхности. При низких температурах, когда пары идеальны, химические потенциалы - μ_{ep} и μ_{ip} близки к своим предельным значениям, определяемым термо- и электрохимическими константами вещества, и слабо зависят от температуры. Это позволяет (если в качестве химического потенциала электрона принять величину работы выхода W_e) выразить $\Delta\varphi^*$ через потенциал ионизации атома и энергию сублимации (либо давление насыщенных паров) $\Delta_s H^0, I, W_e$ (6.108)

$$e\varphi\{L, \diamond, n_p, T\} \approx e\Delta\varphi^*(T = 0) = \frac{1}{2}[\Delta_s H^0 + I] - W_e. \quad (6.120)$$

Величина $\Delta\varphi^*$ для некоторых металлов приведена в таблице:

Сказанное выше означает, что в отличие от случая равновесия КДФ-частицы с плазмой только по обмену электронами, когда при взаимном удалении друг от друга КДФ-частиц их заряд неограниченно возрастает [47], в случае полного термодинамического равновесия заряд, приобретенный частицей, ограничен сверху по абсолютной величине.

$$|\varphi\{L, \diamond, n_p, T\}| \leq |\varphi\{L, \diamond, 0, T\}|. \quad (6.121)$$

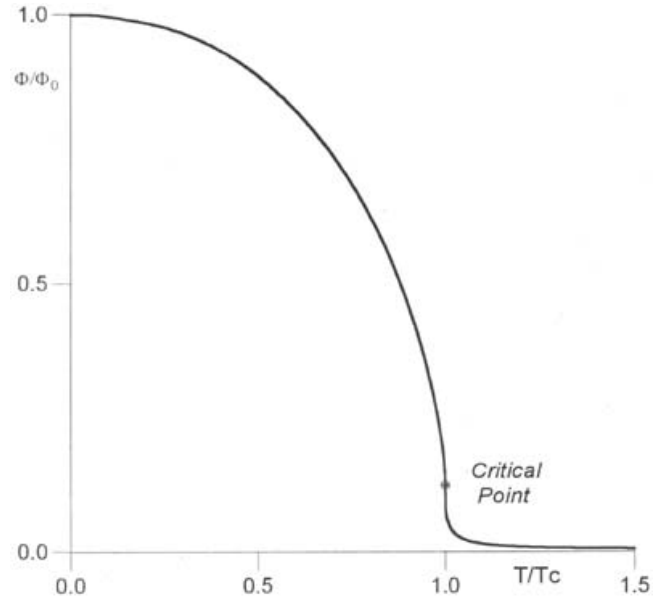


Рис. 6.18: Относительная величина потенциала межфазной границы $\Delta\varphi(T, Z)/\varphi(0, Z)$ для единого перехода кристалл-флюид в модели ОСР(с) для $Z = Z_1^* \approx 34.6$. (Нижняя граница коридора значений величины заряда иона Z [216], приводящей к аномальной фазовой диаграмме модели (см. текст)). $\{\Delta\varphi(T = 0) \approx 1460V, \varphi(T = T_c)/\Delta\varphi(T = 0) \approx 0.124$ [215].

друг от друга частиц потенциал приближается к ограничивающей его сверху предельной величине $\Delta\varphi^*$, зависящей лишь от материала частицы и соответствующей предельному случаю плоской поверхности. При низких температурах, когда пары идеальны, химические потенциалы - μ_{ep} и μ_{ip} близки к своим предельным значениям, определяемым термо- и электрохимическими константами вещества, и слабо зависят от температуры. Это позволяет (если в качестве химического потенциала электрона принять величину работы выхода W_e) выразить $\Delta\varphi^*$ через потенциал ионизации атома и энергию сублимации (либо давление насыщенных паров) $\Delta_s H^0, I, W_e$ (6.108)

Зависимость потенциала φ от температуры, а также от размера, формы и концентрации частиц может быть в принципе успешно вычислена методами функционала плотности. Знание же этой зависимости дает возможность, измеряя величину φ , получать информацию о количестве, размерах и дисперсности частиц в КДФ-плазме.

6.4.4 Фазовые переходы в кулоновских системах

Приближение сплошной среды, т.е. замена реальной системы дискретных частиц гипотетической псевдожидкостью с чисто локальными (т.е. зависящими только от плотности и температуры в данной точке) свойствами, используется не только в задачах гидродинамики, но и при описании стационарных пространственных распределений заряженных частиц в окрестности источника неоднородности. Хорошо известными являются задачи о равновесном профиле электронов в атомной ячейке [84], о профиле плазмы вблизи заряженной стенки [175], о профиле свободных зарядов вблизи частицы конденсированной дисперсной фазы ("пылевая плазма") [47], о пространственном распределении электронов и ионов в Z -пинче [111], и другие. Общее для всех этих задач - представление о локальном термодинамическом равновесии (ЛТР) и, соответственно, локальном уравнении состояния (УРС), связывающем местные температуру, плотность и (локальные) химические потенциалы всех сортов частиц. Во многих случаях используется УРС идеального газа, т.е. системы некоррелирующих частиц, взаимодействующих лишь "в среднем". Хорошо известны два варианта такого безкорреляционного приближения: - приближение Пуассона-Больцмана для невырожденных частиц и приближение Томаса-Ферми для вырожденных [84]. Одна из причин их неточности [84] - использование локальных УРС идеального газа. Известны варианты модернизации приближений Пуассона-Больцмана и Томаса-Ферми путем учета межчастичных корреляций все еще в рамках ЛТР - приближения Пуассона-Больцмана-Дебая и Томаса-Ферми-Дирака. Очевидным логическим завершением этой линии является использование все еще в рамках ЛТР точного локального УРС взаимодействующей (неидеальной) системы электронов, либо системы ионов (например, как неидеальной системы заряженных твердых сфер) [64], [66]. При этом точно учитываются эффекты корреляции, но пренебрегается эффектами нелокальности. Вообще говоря, такой подход считается некорректным в явно микроскопических объектах - электроны в атомной ячейке, они же на границе проводника [175] и др. ("превышение точности") [84]. Однако, для других объектов, чей масштаб ближе к макроскопическому (много частиц), использование приближения ЛТР более оправдано. Кроме того в контексте данного рассмотрения доминирующим является проблема фазовых переходов в кулоновских системах и все связанные с этим особенности протекания процессов в плазме [66].

Одним из примечательных свойств процедуры использования приближения ЛТР при решении задач термоэлектростатики в низкотемпературной плазме является достаточно неожиданная связь явления, имеющего для макроскопической системы смысл и вид фазового перехода, с возможными аномалиями, которые могут проявиться на микро-уровне в виде разрывов в равновесном профиле пространственного заряда [66]. Такие аномалии в профиле возникают именно в результатах расчетов, использующих какую-либо разновидность статистического приближения ЛТР, начиная с приближений типа Томаса-Ферми-Дирака или Пуассона-Больцмана-Дебая, и кончая использованием "точного" УРС системы электронов или ионов [66].

Как уже указывалось выше (см. §6.1) все задачи термоэлектростатики могут быть сформулированы как задачи на экстремум термодинамического потенциала как функционала от одночастичной плотности зарядов - $n(\mathbf{r})$ - приближении функционала плотности: (см. (4.46)-(4.48)).

$$F[n(\cdot)] = Ze \int \varphi_{ext}(\bar{x}) \cdot n(\bar{x}) d\bar{x} + \frac{Z^2 e^2}{2} \int \frac{n(\bar{x}) \cdot n(\bar{y})}{|\bar{x} - \bar{y}|} d\bar{x} d\bar{y} + F^*[n(\cdot)]. \quad (6.122)$$

В приближении ЛТР для фигурирующей в (6.122) обменно-корреляционно-кинетического члена F^* используется локальная плотность свободной энергии $f(\mathbf{r})$, соответствующая макроскопической системе зарядов (ионов, либо электронов) - $F(N, V, T)$, в том числе и неидеальной.

$$F^*[n(\cdot)] = \int f(\bar{n}) \cdot n(\bar{x}) d\bar{x}, \quad f(n) = \lim_{N \rightarrow \infty, N/V=n} \left\{ \frac{F(N, V, T)}{N} \right\}. \quad (6.123)$$

Как следствие - все аномалии макроскопического УРС неидеальной системы $F(N, V, T)$ оказываются непосредственно включенными в процедуру поиска экстремума функционала (6.122)-(6.123).

Данная проблема изучалась в работах [64], [66], [67], [214], [215], [216]. Итоги этого анализа можно сформулировать следующим образом:

1. Несмотря на отталкивание одноименных зарядов, учет их индивидуальных корреляций в рамках приближения ЛТР (6.122)-(6.123) равносильно дополнительному притяжению. Соответственно, профили заряда в этом случае становятся более крутыми, чем при расчете в бескорреляционном приближении (Томаса-Ферми либо Пуассона-Больцмана).
2. При достаточно низких температурах ($T < T_{кр}$) этот эффект может быть столь велик (несмотря на малость параметра неидеальности, выраженного через среднюю плотность) что при определенном сочетании параметров может привести уже к качественному перестроению искомого профиля заряда, т.е. к: появлению в нем разрыва.
3. Характеристики этого разрыва носят отчетливые признаки термодинамических объектов (момент появления разрыва и локальные плотности профиля на границах разрыва зависят только от температуры).
4. Факт появления разрыва и параметры, при которых это происходит, получают естественную интерпретацию в терминах фазового перехода в однокомпонентной модели плазмы ОСР(с) [66], уравнение состояния которой приходит на смену УРС идеального газа в локальном функционале плотности (6.122)-(6.121) при ЛТР-учете корреляции зарядов.

Сделанные выше утверждения существенно опираются на следующее обстоятельство: - поскольку в выражении (6.122) усредненное кулоновское взаимодействие зарядов (электронов, либо ионов) вынесено в отдельное (второе) слагаемое, корреляционный (третий) член в правой части (6.122) отвечает свободной энергии однокомпонентной системы зарядов на электростатическом компенсирующем фоне (ОСР).

Подчеркнем, что в (6.122)-(6.123) нам требуется УРС модели ОСР именно с однородно сжимаемым фоном, то есть ОСР(с) [66]. Радикальное отличие этой разновидности модели от рассматриваемой обычно, [171] состоит в наличии, помимо кристаллизации, дополнительного чисто кулоновского фазового перехода газ-жидкость с верхней критической точкой [66]. Именно этот фазовый переход и соответствует на языке макроскопической однородной плазмы вышеуказанному разрыву в профиле электронов (либо ионов), а условия его (разрыва) появления - условиям достижения границы насыщения фазового перехода в ОСР(с).

$$T < T_{кр}^{ОСР} \quad n(r) \geq n(r)_{насыщения}(T). \quad (6.124)$$

Следует подчеркнуть, что это "фазовое расслоение" экранирующего заряда происходит в системе взаимно отталкивающихся частиц и, по-видимому, является одним из примеров ситуации, когда малость оцененного по Томасу-Ферми (либо по Пуассону-Больцману) параметра неидеальности $\Gamma(r)$ никак не гарантирует не только количественной, но и качественной правильности профиля заряда, который дает это приближение. Проиллюстрируем все вышесказанное примерами:

Иллюстрации и приложения

Профиль электронов в атомной ячейке

В иерархии приближений, используемых для решения этой задачи, широко используется бескорреляционное приближение Томаса - Ферми (ТФ), дающее гладкий монотонный профиль. Учет корреляций (неидеальности) электронов в ячейке на уровне локальных поправок соответствует приближению Томаса-Ферми-Дирака (TFD) и его модификациям совокупно обозначаемым иногда как - ТФС (см.подробнее [26], [84]). Полный учет корреляций электронов в рамках ЛТР - использованию в (6.122)-(6.123) УРС однокомпонентной модели электронного газа (взаимодействующих электронов) на однородном электростатическом компенсирующем фоне (модель "желе"). Согласно утверждениям работ [66], [215] в этой модели имеется фазовый переход 1-го рода типа газ-жидкость с верхней критической точкой с параметрами, приведенными на рис. 6.19 и в Таблице А1:

Is - ОСР ионов ($Z = 1$) на компенсирующем фоне идеального ферми-газа электронов,

Id - "Сдвоенная" модель ОСР (Double-ОСР) - суперпозиция ОСР ионов и электронов,

Is - Модель квантового электронного газа

Id - Безассоциативная модель электрон-позитронной плазмы

Таблица А1. Параметры фазовых переходов в модели квантового электронного газа и "сдвоенной" модели ОКП (Double-ОСР) для нескольких значений величины заряда иона Z : I - параметры критической точки, II - параметры тройной точки. (из работы [215])

$$\Gamma \equiv \left(\frac{4\pi n}{3}\right)^{1/3} \left(\frac{Z^2 e^2}{kT}\right) \quad \Lambda_e^2 \equiv \frac{2\pi \hbar^2}{m_r kT} \quad r_S^{-3} \equiv \frac{4\pi n_e a_0^3}{3} \quad a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

	$Z(Double - OCP)$	1	2	3	10	Electron.gas
I	$T_C(Ry)$	0.100	0.283	0.508	2.69	0.0475
I	Γ_C	5.54	9.43	13.2	39.4	4.54
I	$(r_S)_C$	3.58	2.38	1.86	0.87	9.27
I	$(n_e \Lambda_e^3)_C$	7.26	5.22	4.55	3.60	1.29
I	$\{p/(n_i + n_e)kT\}_C$	0.107	0.111	0.115	0.122	0.0655
II	$T_{tr}(Ry)$	0.00767	0.0333	0.0803	1.15	-
II	$(\Delta n/n)_{tr}$	0.012	0.014	0.015	0.018	-

В конкретных вычислениях работы [215] использовалась аналитическая аппроксимация УРС модели электронного газа, предложенная в [213]. Главный результат расчетов [215] состоит в том, что, при достаточно низких температурах и плотностях (6.124) в равновесном профиле заряда появляется разрыв плотности. Примечательно, что момент появления разрыва в точности соответствует критической температуре фазового перехода типа флюид-флюид в модели однородного электронного газа, а локальные плотности на краях этого разрыва - плотностям сосуществующих фаз указанного перехода. Соответственно, величина скачка плотности на разрыве растет с понижением температуры, так что при $T \ll T_{cr}^{OCP}$ все электроны атомной ячейки отчетливо распадаются на конденсированную "каплю", центрированную на ядре $+Z$, и диффузную атмосферу ("корону") на периферии атомной ячейки (рис. 6.20) [66]. Заметим, что при $T = 0$ плотность этой "короны" равна нулю, и этот, последний факт известен, как эффект "конечности размера" атома в приближении Томаса-Ферми-Дирака (см. [26]). В контексте настоящего анализа этот факт, как и родственные ему особенности при $T > 0$, получают естественную интерпретацию в терминах кулоновского фазового перехода в модели ОКП [66].

Итак, обсуждаемые разрывы в профиле электронов атомной ячейки, появляющиеся при низких температурах, обязано этим появлением фазовому переходу в однородной макроскопической кулоновской системе электронов (либо ионов в других приложениях, см. ниже). Примечательно, что в свою очередь, разрывы в электронной плотности своим следствием имеют дальнейшие аномалии в результатах приближенного расчета термодинамики другой макроскопической системы - реального вещества. Как известно, традиционное назначение упомянутых расчетов профиля электронов атомной ячейки - описание вклада электронной составляющей в суммарном уравнении состояния сжатого вещества [26], [84]. При этом использовании центральную роль играет плотность электронов на границе ячейки - $n_e(R)$. В частности, во всех вариантах использования приближения ЛТР только эта граничная плотность

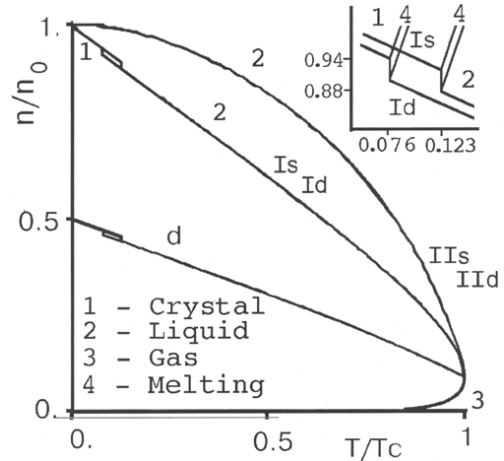


Рис. 6.19: Фазовая $\rho - T$ граница перехода типа газ-жидкость [66] в координатах (ρ/ρ_0) и (T/T_C) (ρ_0 - "нормальная" плотность - $\rho(T = 0)$). На вставке - фазовые границы моделей Is и Id в районе тройной точки [215]) 1 - кристалл, 2 - жидкость, 3 - газ, d - "диаметр" фазовой границы в Is и Id .

определяет величину электронной составляющей полного давления $\{p_e = f[n_e(R)]\}$.

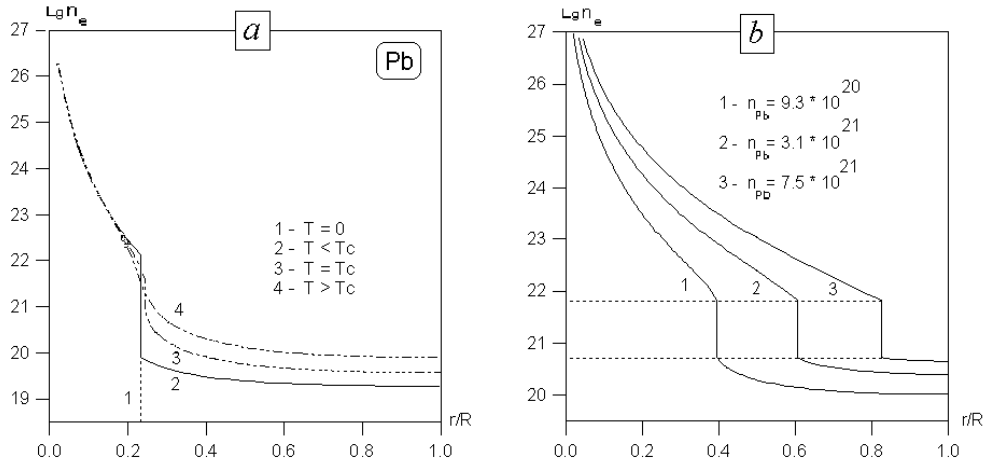


Рис. 6.20: Профиль электронной плотности в атомной ячейке Pb ($Z = 82$) радиуса $R = (3/4\pi n)^{1/3}$, рассчитанный минимизацией функционала (6.122) с использованием локального уравнения состояния (6.123) модели квантового электронного газа (Пс) [215], (a) - $n = const = 2_{10} + 20[\text{см}^{-3}]$, 1 - $T = 0$, 2 - $T = 0.8T_c$, 3 - $T = T_c$, 4 - $T = 1.20T_c$, (b) - $T = const (T < T_c)$, 1 - $n = 9.3_{10} + 20$, 2 - $n = 3.1_{10} + 21$, 3 - $n = 7.5_{10} + 21$, T_c - критическая температура перехода флюид-флюид в модели электронного газа [66] - $kT_c \simeq 0.65\text{eV}$.

Вышеупомянутая аномалия в уравнении состояния появляется [66], [215], когда при сжатии атомной ячейки ее граница касается соответствующего разрыва в электронной плотности.

Из-за неидеального характера локального УРС электронов суммарные давление и химический потенциал остаются непрерывными при скачкообразном изменении плотности электронов на границе ячейки. Однако производные этих величин по плотности терпят разрыв. Результирующая аномалия в УРС имеет вид излома, т.е. разрыва второго рода (рис. 6.21).

Примечательно, что в координатах давление - температура для электронной составляющей полного давления соответствующая кривая полностью эквивалентна кривой испарения вышеупомянутого фазового перехода флюид-флюид в модели электронного газа. Дальнейший учет нелокальности электронов сглаживает обсуждаемую аномалию, так что она не означает реального фазового перехода второго рода в веществе, а всего лишь

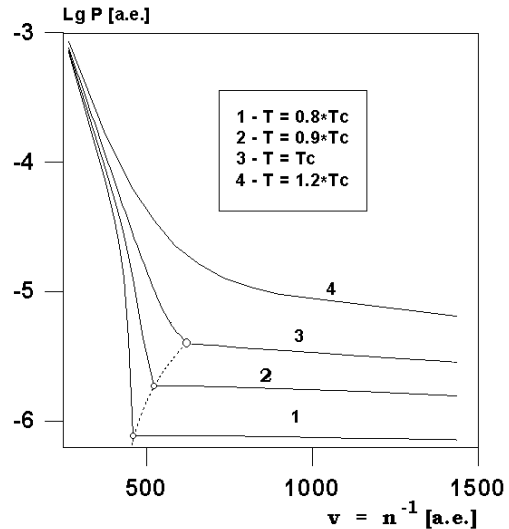


Рис. 6.21: Электронная составляющая полного давления плазмы свинца ($Z = 82$) для ячейочной модели и локальным УРС ОСР для профиля электронов в ячейке (6.122-6.123) 1, 2 - докритические изотермы, 3 - критическая и 4 - закритическая изотермы ($kT_c \approx 0.65\text{eV}$), штриховая линия - аномалии уравнения состояния [215]).

резкое падение сжимаемости вещества, имитирующее наличие "собственного объема" атома (рис. 6.21).

Обсуждаемый распад электронного профиля в приближении ТФС дает более богатый по своим свойствам объект при выходе за рамки приближения одноядерной сферической атомной ячейки и перехода к многоядерной системе. Так в работе [182] использовалось сочетание метода молекулярной динамики для ионов (ядер) в комбинации с приближением ТФС для отдельного расчета на каждом шаге профиля электронов (несферического) окружающего каждый ион (ядро). Из всего вышесказанного вытекает, что при таком использовании приближения ЛТР для электронов профиль последних при низких температурах $T \leq T_{cr}^{OCP}$ (6.124) распадется на локализованные на ядрах капли и диффузную межядерную "атмосферу" свободных электронов. При этом не принципиально, какой вариант корреляционного локального УРС для электронов используется для расчета их профиля. Обсуждаемая аномалия должна проявиться уже в приближении Томаса-Ферми-Дирака [66]. В отличие от случая одноядерной сферической ячейки в многоядерном варианте [182] образующиеся электронные "капли" получают возможность вращений и колебаний, а также взаимной поляризации или даже, что представляется наиболее интересным, слипания капель при сближении ядер вплоть до возможно полного распада системы на две фазы разной плотности [215]. При этом два фазовых перехода макро-уровня оказываются тесно связанными друг с другом через использование варианта приближения ЛТР ("гипотезы квазиоднородности [84]) для расчета профиля электронной плотности - характерной задачи микроуровня.

Профиль ионов вокруг заряженной КДФ-частицы в "пылевой" плазме

Возможен случай, когда КДФ-частицы заряжаются отрицательно, собирая вокруг себя плотное термически равновесное экранирующее облако из положительных ионов. При некотором сочетании исходных параметров (см. обзор [47]) такая плазма будет сильно неидеальной ($\Gamma \gg 1$). Корректный расчет распределения заряда в этой ситуации требует учета корреляции ионов. Качественно учет указанной корреляции приведет к эффективному дополнительному притяжению ионов и увеличению заряда КДФ-частицы и плотности ионов у ее поверхности по сравнению со стандартным расчетом по уравнению Пуассона - Больцмана [47]. Простейший способ учета этого эффекта - переход от больцмановской (т.е. идеально газовой) зависимости локальной плотности заряда от самосогласованного псевдопотенциала в уравнении Пуассона к неидеальной зависимости, соответствующей локальному уравнению состояния ОКП классических ионов с твердосферным отталкиванием на близких расстояниях. Необходимо отметить, что неизбежным следствием такого шага явится (при $T < T_{кр}^{ОКП}$) разрывное решение для плотности ионов [66], своим появлением обязанное наличию в уравнении состояния ОКП ионов фазового перехода газ-жидкость, обсуждаемого в данной статье. Качественно итоговый профиль ионов, как и в рассмотренном выше случае профиля электронов в атомной ячейке, распадается при $T < T_{кр}^{ОКП}$ на плотную "пленку" (жидкую или кристаллическую) на поверхности КДФ-частицы и диффузную "атмосферу" вдали от неё. Реальное вычисление обсуждаемого профиля затруднено ввиду отсутствия хороших аппроксимаций для локального уравнения состояния ОКП заряженных твердых сфер.

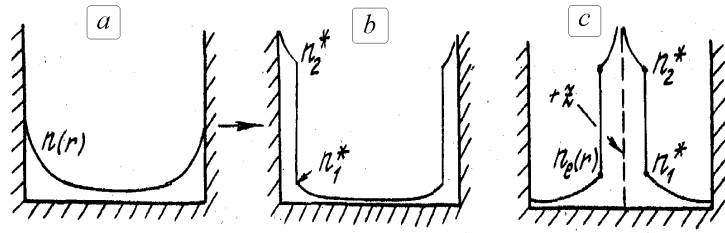


Рис. 6.22: Гипотетический вид профиля зарядов в макроскопической полости (a,b) и в атомной ячейке (c). (a) - безкорреляционное приближение, (b,c) - приближение ЛТР (квазиоднородности) в сочетании с локальным УРС неидеальной ОКП зарядов. При $T < T_C^{(OCP)}$ [67].

Объемный заряд в макроскопической полости.

Модель является упрощенной идеализацией такой, например, реальной системы, как электроны, "запертые" в макроскопической полости внутри жидкого гелия (так называемые "бабблоны" [115]) и др. Равновесный профиль заряда определяется равенством между электростатическим расталкиванием, прижимающим заряды к стенкам полости, и "энтропийным" стремлением занять все доступное пространство. Бескорреляционное приближение дает гладкий профиль, изображенный на рис. 6.22. Переход в приближение (6.122)-(6.123) к неидеальному уравнению состояния приведет (при $T < T_{кр}^{ОКП}$) к аномалиям, вид которых зависит от природы запертых в полости зарядов. Для классических точечных зарядов при любых параметрах минимизация уравнений (6.122)-(6.123) приведет к бесконечно тонкой пленке на поверхности полости. Для системы же электронов или классических заряженных твердых сфер при $T < T_{кр}$ возможно расслоение заряда на плотную приповерхностную пленку сильно вырожденных электронов или плотно упакованных шаров (ионов) теперь уже конечной концентрации и толщины, и диффузную внутреннюю область низкой плотности (рис. 6.22).

Отметим, что рассматриваемые здесь результаты, даваемые локальным приближением (6.122)-(6.123), имеют преимущественно методическую ценность как промежуточные между результатами бескорреляционного приближения и более сложных приближений, где учтены эффекты, приводящие к нелокальности функционала $F^*\{n(\cdot)\}$ (6.122).

Профиль заряженных КДФ-частиц в неоднородной "пылевой" плазме в окрестности источника неоднородности

В случае ансамбля термически равновесных КДФ-частиц вблизи, например, заряженной стенки эта, теперь уже плоская задача также может быть сведена к задаче на поиск экстремума функционала плотности (6.122)-(6.123). Макроскопичность задачи в большей степени оправдывает использование приближение ЛТР (6.123) с учетом корреляции заряженных КДФ-частиц в рамках локального УРС неидеальной однокомпонентной системы заряженных твердых сфер (ОСР-НС). Как и ранее, при относительно низких температурах, $T < T_C^{(OCP-HS)}$, в результатах такого расчета возможно появление разрыва в равновесном профиле КДФ-частиц, связанное со своеобразным проявление фазового перехода газ-жидкость в модели ОСР-НС [66], [215]. В результате при этих условиях можно ожидать распада профиля КДФ-частиц

на плотную "пленку" на поверхности заряженной стенки и диффузную атмосферу вдали от неё. Реальное вычисление обсуждаемого эффекта более сложно, чем в рассмотренных выше примерах, поскольку эффективное взаимодействие между КДФ-частицами отличается от чисто кулоновского за счет экранирования частиц свободными ионами пылевой плазмы (см. в связи с этим главу VII.2 [160]).

Пространственное распределение зарядов в сильноточном релятивистском разряде

Среди обширного комплекса задач, связанных со всей проблемой в целом [111], может быть выделена относительно простая задача о расчете взаимосвязанных профилей ионов и электронов. Это уже двухкомпонентная система. Однако из-за большой средней скорости токнесущих электронов относительно практически неподвижных ионов обе подсистемы можно в хорошем приближении считать не коррелирующими друг с другом (т.е. взаимодействующими лишь "в среднем") [111]. Вместе с тем корреляции внутри каждой из подсистем полностью развиты, так что, решая задачу о пространственном распределении зарядов, мы в хорошем приближении имеем дело с комбинацией двух однокомпонентных систем, как бы "вложенных" друг в друга ("сдвоенная" модель ОКП [66]). При этом вся задача может быть как и во всех приведенных выше примерах сведена к поиску экстремума функционала плотности подобного (6.122)-(6.123), но теперь уже в двухкомпонентном варианте. Вполне реальной согласно [112] является ситуация, когда на каком-то этапе разряда подсистема ионов является плотной и холодной и, следовательно, сильнонеидеальной. Как и в предыдущих примерах, переход в описании профиля ионов от бескорреляционного приближения Пуассона-Больцмана в рамках задачи на экстремум (6.122)-(6.123), к приближению, учитывающему корреляцию ионов, потребует использования локального УРС модели ионов на сжимаемом компенсирующем фоне. Как и ранее, содержащиеся в этой последней модели фазовые переходы типа газ-жидкость-кристалл могут проявиться в относительно низком диапазоне температур и плотностей (6.124) в виде соответствующих этим переходам разрывам в искомом профиле ионов [67].

6.4.5 Оценки параметров критической точки металлов

Данные о высокотемпературных свойствах уравнения состояния (УРС) металлов, включая критические параметры (КП) перехода газ-жидкость, необходимы для разработки перспективных энергоустройств [57], [32], [162], [60]. Это особенно важно для урана и урано-содержащих компаундов [32], [59], [62], [40], [217]. Кроме того, физический интерес к свойствам металлов в окрестности критической точки обусловлен ожиданием искажения свойств перехода газ-жидкость в металлах под влиянием сильного кулоновского взаимодействия [103], а также возможного проявления в этом диапазоне параметров дополнительного гипотетического "плазменного фазового перехода" (ПФП) (см. напр. [69], [218])

Параметры критической точки для большинства металлов (исключая щелочные металлы и ртуть) труднодоступны для экспериментального измерения (см. раздел I). В связи с этим широко используются различные способы оценки критических параметров на основе экстраполяции известных низкотемпературных свойств металлов в конденсированном состоянии. При этом не является принципиальным, проводится ли такая оценка критических параметров с использованием каких-то полуэмпирических

"правил", как например "правила" корреляции критической температуры и теплоты испарения, или же "правила прямолинейного диаметра" и т.д. [69], или же с использованием какой-либо приближенной алгебраической формы уравнения состояния, начиная от простейших УРС типа Ван дер Ваальса [289], [291], а также модификаций термодинамической теории возмущений (ТТВ) (например [40], [217]) и кончая так называемыми "широкодиапазонными" уравнениями состояния [17]. Принципиальным же является выбор тех низкотемпературных свойств, которые используются далее в рамках полуэмпирических "правил", или же служат основой при "калибровке" параметров приближенного УРС с последующим вычислением параметров критической точки. Описанная процедура существенно неединственна. Среди совокупности вышеупомянутых низкотемпературных свойств можно (условно) выделить три основные группы: - калорические величины (теплота испарения, теплоемкость и др.), термические величины (коэффициент термического расширения, сжимаемость и др.) и энтропийные (химический потенциал жидкости в точке плавления и др.). Доминирующим является подход, использующий для оценок параметров критической точки табличную калорическую величину - теплоту сублимации, $\Delta_S H^0$. Для урана $\Delta_S H^0 \cong 533 \text{ кДж/mol} \approx 5.5 \text{ eV/at}$. [135]. Это приводит к высоким значениям критических параметров - $T_c(K) // p_c(\text{MPa})$:

$$13040 \text{ K} // 850 \text{ MPa} (\text{Young \& Alder} [289]) \div 11630 \text{ K} // 611 \text{ MPa} (\text{Фортов и др.} [69]). \quad (6.125)$$

Альтернативный подход использует характеристику термического УРС - и в первую очередь коэффициент теплового расширения жидкого металла, $\alpha_p \equiv (\partial \ln \rho / \partial T)_p$. Для большинства металлов (и неметаллов) оба подхода дают как правило близкие результаты. Однако есть все основания полагать [72], что именно уран (а также ряд других металлов) являются важным исключением из этого правила (см. рис. 6.23). В частности, в случае урана 2-й подход приводит к оценкам - $T_c(K) // p_c(\text{MPa})$:

$$6620 \text{ K} // 416 \text{ MPa} (\text{D. Young} [291]) \div 5000 \div 6500 \text{ K} // (\text{Иосилевский} [72]). \quad (6.126)$$

Представленное на рис. 6.23 расхождение результатов оценок [60] и [32] является чрезвычайным и ведет к серьезным последствиям (см. [32], [72] и ниже). Вероятность такой аномалии для урана и других металлов (и неметаллов) тесно связана с величиной безразмерного параметра $\eta^* \equiv kT^* / \Delta_S H^0 \{ T^* \equiv T_{\text{melt}} + \alpha_{p(T=T_{\text{melt}})}^{-1} [\alpha_p \equiv \rho^{-1} (\partial \rho / \partial T)_p] \}$

Помимо урана можно выделить группу металлов, которым соответствует низкая величина параметра η^* . Это иллюстрируется ниже в таблице I для нескольких "плохих" металлов в сравнении с "хорошим" металлом, Cs. Помимо металлов в таблице приведены данные для важного в прикладном отношении соединения - диоксида урана UO_2 [221], [40], [217].

Примечания к табл. I

- (x) Оценка T_C на основе калорического УРС жидкой фазы (Фортов и др. [147])
- (xx) Оценка T_C на основе термического УРС жидкой фазы (Young и др. 1977)
- (x*) Оценка T_C на основе калорического УРС (Корр-Lang rule: $T_c^{KL} \approx 0.2 \Delta_S H^0$)
- (**) Эстраполяция "но ноль" плотности жидкой фазы UO_2 ($T_C \approx T_0^{(\rho)}$).

В свете обсуждаемого противоречия оценок T_C , опирающихся на калорические (6.125) и термические (6.126) свойства жидкого металла уран (рис. 6.25) не является исключением. В большей или меньшей мере эта ситуация идентична и для остальных

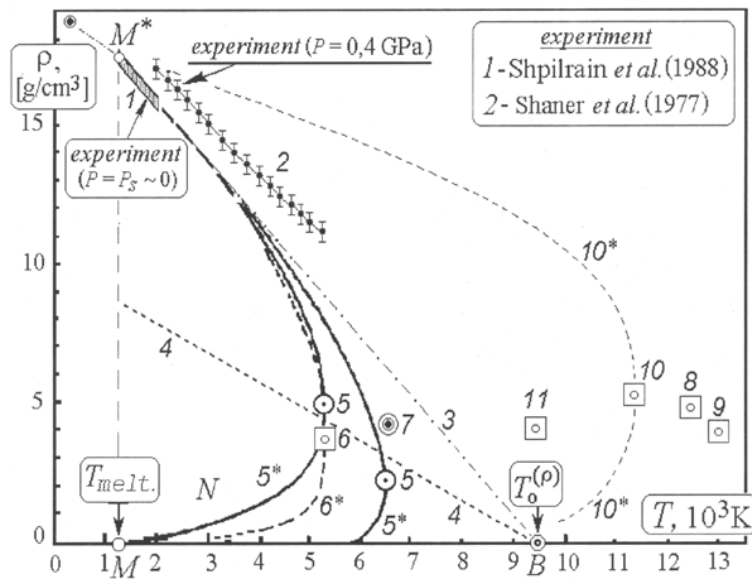


Рис. 6.23: Сравнение вариантов предполагаемой границы равновесия газ-жидкость урана и существующих оценок параметров его критической точки. Данные эксперимента: (термическое уравнение состояния): 1 - [158], 2 - [275], Теоретические оценки: 3,4 - экстраполяция "на ноль" экспериментальной плотности жидкого урана [158] и "диаметра" пограничной кривой (4) к характерной температуре T^* (точка B), 5, 5* - варианты реконструкции фазовой границы и крит.точки [74] по данным эксперимента [158], 6, 6*- реконструкция фазовой границы [74] в предположении термодинамического подобия экспериментально известной границе Cs, 7 - оценка параметров критической точки урана на основе экспериментальных данных (2) [275] (D.Young [291]), Оценки КТ урана на основе calorических свойств жидкого урана: 8 - Grosse (1961), Gathers et al., (1974), 9 - [289], 10 - [69], 10* - гипотетическая фазовая граница (схематично) совместимая с КТ 10, 11 - оценка КТ на основе "плазменной гипотезы" [103] (Илл. из [74])

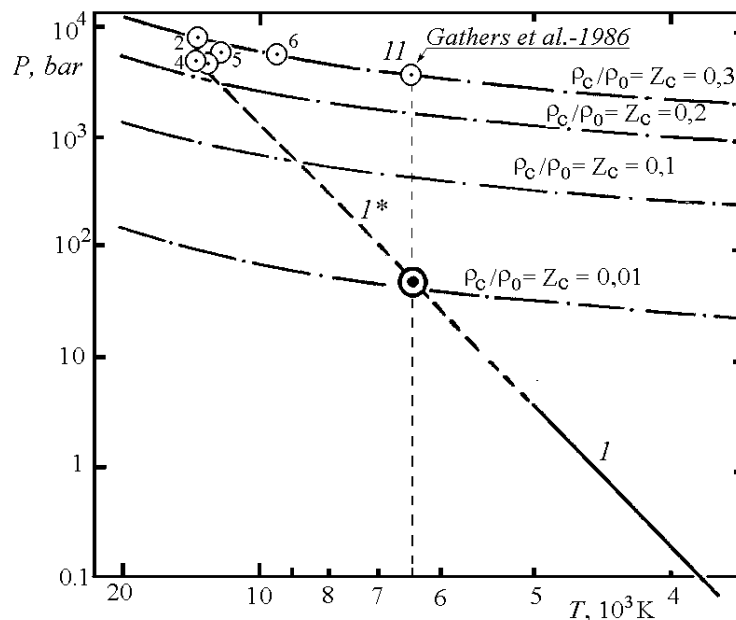


Рис. 6.24: Сводная $p - T$ диаграмма испарения урана [74].

Вещество	U	V	Co	Mo	Ta	W	UO_2	Cs
$\Delta_S H^0, eV/atom$	5.54	5.33	4.39	6.80	8.10	8.81	6.27	0.809
T^*, K	9500	12000	9800	15000	16000	18000	12650	3610
$\eta^* \equiv kT^*/\Delta_S H^0$.147	.194	.192	.190	.170	.176	.174	.385
$T_C^{(x)} K$	11600	12500	10500	16100	20600	21000	14500^{(x*)}	2060
$kT_C^{(x)}/\Delta_S H^0$	0.181	0.202	0.205	0.205	0.219	0.205	0.20	0.219
$T_C^{(xx)}, kK$	6600	6400	-	8000	9300	-	7000^{(**)}	2020

приведенных в таблице металлов с низкой величиной параметра η^* . В качестве примера на рис. 6.25 приведена фазовая диаграмма плотность-температура для другого металла, кобальта, где возникает сходное противоречие между оценками положения критической точки исходя из термических и калорических свойств жидкого кобальта.

На рис. 6.24 обозначено: - 1, 1* - экспериментальная кривая насыщения урана (База ИВТАН-ТЕРМО [135] и ее экстраполяция, 2 - линии равенства критического фактора сжимаемости и отношения критической и нормальной плотностей (эмпирическая закономерность) $\{\rho_C/\rho_0 \approx Z_C \equiv (pV/RT)_C\}$, 3 - универсальная зависимость $p_C(T_C)$ ("плазменная" гипотеза А.Ликальтера [103], см. также Н.Несс-1995), 11 - соответствующая оценка КТ [103], Оценки КТ урана на основе калорических свойств жидкого U, 4 - Hornung, 1975, 8 - 10 - как на рис.1, 5 - реконструкция крит. точки [74] по данным [158], 7 - оценка параметров КТ [291] на основе экспериментальных данных (подчеркнута несовместимость КТ (7) с кривой насыщения урана 1, 1* [135]).

Обсуждаемое расхождение неизбежно ведет к многочисленным противоречиям в результатах устоявшихся полуэмпирических "правил", хорошо выполняющихся для большинства "нормальных" фазовых переходов в металлах и неметаллах. Анализ возможного разрешения указанных противоречий заставляет критически оценить возможность какой-либо из нижеуказанных аномалий в свойствах фазовой диаграммы урана (см. под-

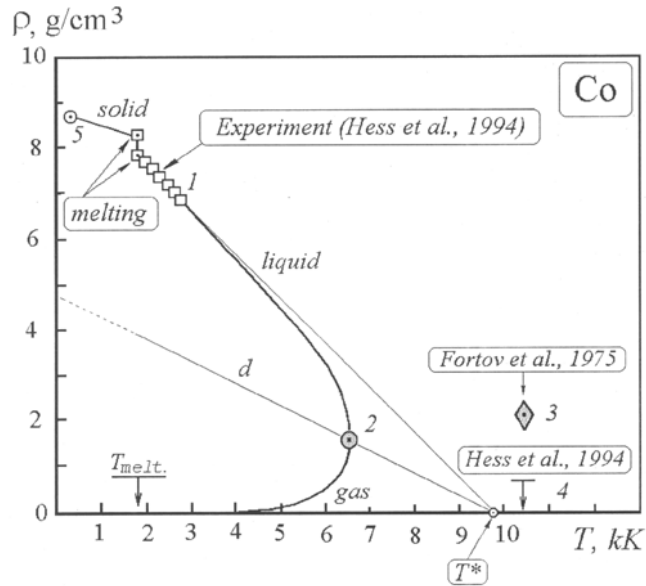


Рис. 6.25: Сравнение параметров критической точки кобальта и границы равновесия газ-жидкость. 1 - Данные эксперименты [210]), T_m - температура плавления кобальта ($T_m \approx 1768 K$), T^* - линейная экстраполяция зависимости плотности жидкого кобальта от температуры $\{T^* \equiv T_m + \alpha^{-1}(T_m), \alpha(T) - \text{коэффициент термического расширения}\}$, d - "диаметр" пограничной кривой $\rho(T)\{d \equiv (\rho_{liq} + \rho_{gas})/2\}$, 2 - реконструкция пограничной кривой кобальта и его критической точки на основе данных [210] 3 - оценка критической точки [69] по теплоте испарения, 4 - оценка критической температуры [210]) из гипотезы корреляции T_C с потенциалом ионизации [103]), 5 - плотность твердого кобальта при нормальных условиях [131][74].

робнее [74]) в сравнении с диаграммами большинства веществ:

- Аномальная потеря обычной выпуклости ρ – T границы двухфазной области на диаграмме плотность-температура (рис. 6.25) (См.в связи с этим [40], [217] и §6.3.5),
- Аномально низкое значение критического фактора сжимаемости, $Z_C \equiv (pV/RT)_c$,
- Аномально высокое отношение "нормальной" и критической плотностей - (ρ_0/ρ_C) ,
- Аномально высокое искривление вверх близкой к квазилинейной (как правило) зависимости давления насыщения от температуры в координатах: $\log p_S - 1/T$ (см.несовместимость оцененной в [291] критической точки (7) с положением линий (1),(1*) на рис. 6.25).

Решение обсуждаемой проблемы, как и вопрос об истинных параметрах КТ урана (и ряда других металлов) в настоящий момент остается открытым. Вместе с тем результаты исследования свойств неконгруэнтного фазового перехода в диоксиде урана [40], [217] и перехода газ-жидкость в модели однокомпонентной плазмы [66], [214], [218] дают ряд серьезных аргументов для решения обсуждаемой проблемы.

6.4.6 Фазовое равновесие в неидеальной химически активной плазме

Знание уравнения состояния (УРС) продуктов нагрева UO_2 необходимо при анализе возможных последствий крупной ядерной аварии на существующих и разрабатываемых на перспективу типах ядерных реакторов, где диоксид урана является штатным топливом. Согласно существующим сценариям такой аварии реально достижимыми в ее процессе Могут быть температуры в несколько тысяч градусов, что соответствует оцениваемым давлениям паров во многие сотни или даже тысячи атмосфер [221], [217]. Принципиальной особенностью процесса испарения диоксида урана является его неконгруэнтный характер, выражающийся в возможности сосуществования фаз с разной стехиометрией. Следствием этого является возможность резкого кислородного обогащения продуктов испарения диоксида урана, что представляет дополнительную угрозу в ряду гипотетических последствий ядерной аварии.

Неконгруэнтный характер испарения является отличительной чертой фазового равновесия в высокотемпературной химически активной неидеальной плазме [40]. Неконгруэнтность резко усложняет структуру и свойства высокотемпературной части фазовой диаграммы широкого класса веществ, представляющих собою химические соединения. Проблемы, вытекающие из этого обстоятельства, являются особенно актуальными для теплофизики фазового равновесия во многих объектах ядерной энергетики, таких как диоксид урана, UO_2 - для действующих реакторов, в особенности для реакторов-размножителей на быстрых нейтронах [221]. Это также важно и для многих разрабатываемых на перспективу ядерных энергоустройств, и, прежде всего для семейства газофазных ядерных реакторов (т.наз. схемы "В" [57], [32], [60], [162]) в различных вариантах которого в качестве рабочих сред широко представлены смеси урана с различными металлами, водородом и др. веществами [32], [60]. Указанная неконгруэнтность имеет принципиальное значение и для схемы газофазного реактора на гексафториде урана, UF_6 [162], [62]. Согласно принятой практике как эксплуатация и модернизация действующих реакторов, так и разработка реакторов

перспективных схем, должна сопровождаться расчетно-теоретическим и экспериментальным исследованием не только штатных режимов, но и возможных последствий гипотетических внештатных ситуаций (аварий), включая и их крайние варианты - т.наз. "запредельные" ядерные аварии.

Ввиду крайней важности проблемы при поддержке ИНТАС [260] была разработана термодинамическая модель высоко нагретого жидкого и газообразного диоксида урана UO_{2+x} . Модель предназначена для описания испарения в уран-кислородной смеси как гипо- так и гипер-стехиометрического состава ($x < 0, x > 0$) [40], [217]. Построенная модель принципиально отличается от всех моделей, развитых ранее для описания термодинамики испарения в высокотемпературном диоксиде урана (см. например [250], [194]). Настоящая модель впервые корректно учитывает указанную выше неконгруэнтность испарения во всем диапазоне температур, и как следствие этого впервые корректно воспроизводит общую структуру всей фазовой границы, включая районы т.наз. ретроградной конденсации, точки экстремально-го давления и температуры фазовой границы и, наконец, "истинную" критическую точку неконгруэнтного испарения. Новое уравнение состояния системы уран-кислород описывает известные свойства жидкого диоксида урана вблизи его температуры плавления и используется далее для экстраполяции термодинамического описания свойств $UO_{2\pm x}$ в области высоких температур, включая параметры перехода газ-жидкость в районе его критической точки. Главной и принципиальной особенностью настоящей модели, отличающей её от предыдущих [250], [194], является то, что самосогласованное термодинамическое описание обеих фаз и соответствующий расчет параметров высокотемпературного равновесия в диоксиде урана строится в рамках единого теоретического подхода ("химическая модель плазмы" см. напр. [32], [41]). Обе сосуществующие фазы описываются как многокомпонентная, сильно взаимодействующая ("неидеальная") смесь химически реагирующих атомов, молекул, атомных и молекулярных ионов и электронов. В непосредственных расчетах равновесной системы уран-кислород использовался следующий набор компонент: $U, U^+, U^{++}, UO, UO_2, UO_3, U_2O_n (n = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6), O, O^-, O^2, UO^+, UO_2^+, UO_2^-, UO_3^-$. При расчете химического и ионизационного равновесия используются термодинамические константы и статистических суммы возбуждения всех атомно-молекулярных составляющих в соответствии с данными последней версии банка данных ИВТАН-ТЕРМО [43], [40]. В реальных расчетах фазового равновесия указанные выше идеально-газовые характеристики дополнялись комплексом так называемых "поправок на неидеальность", самосогласованно учитывающих эффекты всего спектра интенсивных межчастичных взаимодействий в системе [32]. Примечательно, что наряду с ионно-молекулярным представлением, позволившим решить поставленную задачу [217], для описания термодинамики конденсированной фазы оказалось также возможным использовать и т.наз. "высокоионное представление" [202], в рамках которого жидкий диоксид урана описывается как термодинамически равновесная сильно взаимодействующая смесь ионов урана высокой кратности $\{U^{+3}, U^{+4}, U^{+5}, U^{+6}\}$ и ионов кислорода $\{O^{-2}, O^{-1}\}$. Такой подход соответствует принятому трактованию кристаллического диоксида урана в окрестности его нормального стехиометрического состава (O/U 2.0) как высоко-ионного кристалла составленного преимущественно из ионов U^{+4} и O^{-2} . Возможность одновременно успешно описывать на уровне суммарных термодинамических функций столь непростое явление, как неконгруэнтное испарение в активно реагирующей ионной среде системы уран-кислород, может

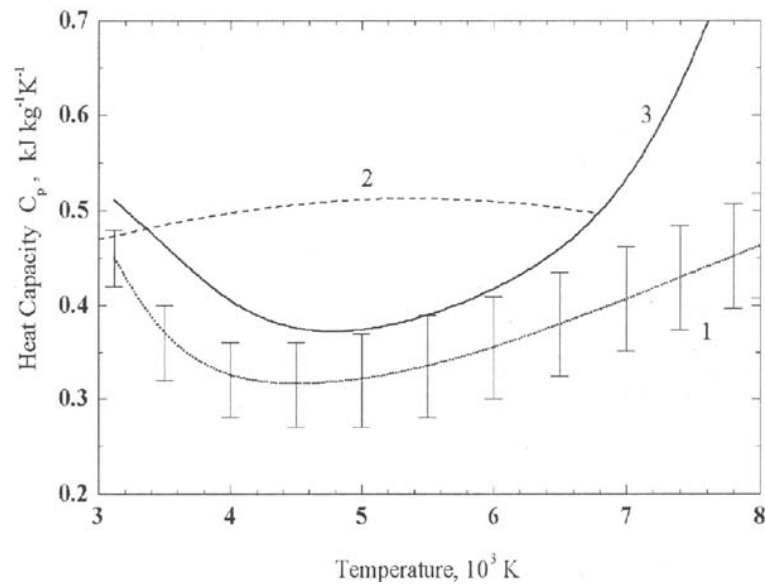


Рис. 6.26: Изобарическая теплоемкость жидкого диоксида урана ($UO_{2.0}$). Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными, 1 - данные измерений Ronchi et al. [268], 2 - результаты расчета по модели [194] (E.Fischer-1989), 3 - результаты расчета настоящей работы (EOS INTAS-99) [40], [217].

рассматриваться как своеобразная иллюстрация т.наз. теоремы Стиллингера-Райсса [279] обосновывающей границы термодинамической эквивалентности плотной ионной (кулоновской) системы и эквивалентной ей системы квазинейтральных "молекул" с эффективным короткодействующим потенциалом взаимодействия.

Для эффективного поиска параметров сосуществующих фаз в условиях активно протекающих химических реакций, ионизации и интенсивного межчастичного взаимодействия необходим специальный алгоритм, реализованный в виде универсального кода "SANA-IV". Базой для его построения послужила модернизация разрабатываемой авторами в течение целого ряда лет методики термодинамического расчета и соответствующего семейства кодов "SANA-N" [58], [32], предназначенных для расчета многокомпонентной, неидеальной, химически реагирующей плазмы.

Принципиальной особенностью рассматриваемого в данной работе неконгруэнтного фазового равновесия является невозможность поиска параметров сосуществующих фаз при помощи стандартного варианта т.наз. правила "двойной касательной" (либо правила "равных площадей" Максвелла). При равенстве температур и суммарных давлений сосуществующих фаз истинное фазовое равновесие в настоящей работе должно находиться непосредственно из условий равенства химических потенциалов для всех нейтральных компонент обеих фаз (атомов и молекул).

Для заряженных частиц (ионов и электронов) фазовому равновесию соответствовало равенство электрохимических потенциалов (см выше §6.3.2-6.3.3). Реальные выражения для всех указанных химических и электрохимических потенциалов, как и для остальных термодинамических функций обеих фаз, включают соответствующие "поправки на неидеальность", самосогласованно учитывающие влияние всех видов межчастичного взаимодействия, включая интенсивное отталкивание всех частиц на близких расстояниях ("собственный объем"), "остаточное" (внехимическое)

короткодействующее притяжение, ответственное за само наличие фазового перехода, а также кулоновское взаимодействия заряженных частиц.

Описание эффектов короткодействующего отталкивания и притяжения в модели опирается на использование варианта термодинамической теории возмущения [163], развитой на основе подхода [170], и модифицированной с учетом особенностей рассматриваемой многокомпонентной химически реагирующей системы [217], [40]. "Кулоновская" неидеальность описывается в рамках специальной модификации развитого для ионных жидкостей "средне-сферического приближения" (Mean Spherical Approximation - MSA), модифицированного на случай многокомпонентной смеси [204].

Параметры взаимодействия различных компонент смеси предварительно оценивались теоретически (А.М.Семенов [221], [40]), а затем "калибровались" [40], [217] по известным свойствам жидкого диоксида урана $UO_{2.0}$ в точке плавления ($T \approx 3120K$). Построенное единое УРС жидкого и газообразного диоксида урана используется далее для расчета параметров равновесия газ-жидкость во всем диапазоне параметров, включая предполагаемый район критической точки ($T \leq 10 - 20 \cdot 10^3 K$, $p \leq 1 - 2 GPa$).

Сравнение результатов расчета равновесного давления паров в диапазоне $T \leq 5500K$ с наиболее надежными экспериментальными данными [176] подтверждает адекватность построенного УРС диоксида урана. Более жестким тестом для теории является сравнение результатов расчета изобарической теплоемкости жидкого диоксида урана с данными измерения этой величины в диапазоне $T \leq 8000K$ [268]. Следует подчеркнуть, что

построенное в данной работе уравнение состояния UO_2 оказалось единственным, способным в настоящее время воспроизвести немонотонный характер экспериментально измеренной температурной зависимости $C_p(T)$ [268] (рисунок 6.26).

Наиболее важным результатом, полученным в рамках проекта INTAS-93-66, является необычная структура предсказываемой фазовой границы процесса испарения диоксида урана. Результаты расчета демонстрируют принципиальное отличие этой структуры от известных аналогов высокотемпературной фазовой границы в "прос-

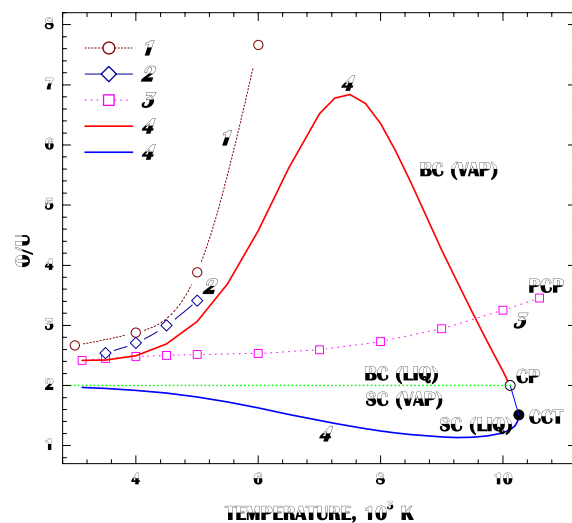


Рис. 6.27: Стехиометрическая диаграмма (отношение O/U) сосуществующих фаз в процессе неконгруэнтного испарения диоксида урана 1 - стехиометрия газовой фазы по модели [198], 2 - то же по результатам расчета равновесного состава в работе [250], 3 - то же согласно расчетам по теории "значимых структур" (SST) с псевдокритической точкой (PCP) [194], 4 - граница двухфазной области неконгруэнтного испарения согласно EOS INTAS-99 [40], [217]. Отмечены: - стехиометрия сосуществующих пара (vap) и жидкости (liq) в режиме кипения (BC) и насыщения (SC), а также истинная критическая точка (CP) и точка максимума температуры на кривой насыщения ("крикондентерм" - CCT)

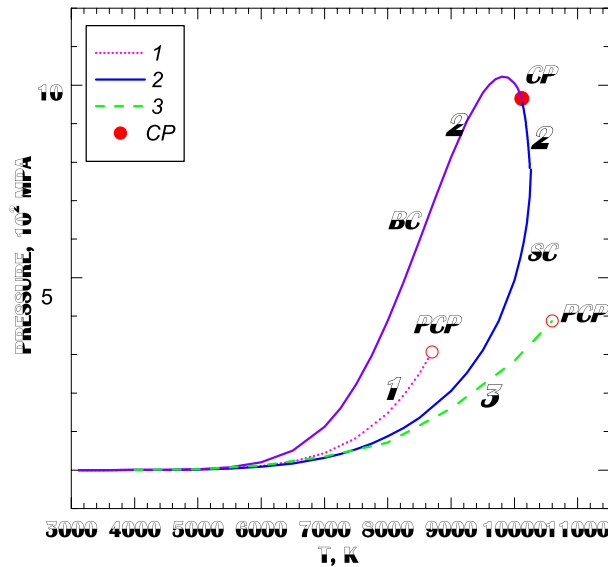


Рис. 6.28: Фазовая $p - T$ диаграмма испарения диоксида урана ($UO_{2.0}$) 1 - кривая насыщения, построенная по стандартному правилу "двойной касательной" ($BC = SC$), с псевдо-критической точкой (PCP), 2 - истинная граница двухфазной области неконгруэнтного испарения с кривой кипения (BC), насыщения (SC) и истинной критической точкой (CP) по результатам настоящей работы, 3 - полное давление пара на кривой кипения и псевдо-критическая точка (PCP) по данным расчета [194] (расчет по теории "значимых структур").

тых" веществах, например в металлах. Это отличие является прямым следствием указанного выше неконгруэнтного характера испарения в неидеальной химически реагирующей плазме, и в частности, в плазме диоксида урана. Главной отличительной особенностью этого испарения является резкая зависимость его параметров, как давления паров, так и степени их кислородного обогащения, от скорости испарения [174]. На языке термодинамики это эквивалентно расщеплению единой для обычных веществ зависимости давления насыщенных паров от температуры, $p_{St}(T)$, на две различающихся границы: - кривой кипения (boiling curve - BC) и кривой насыщения (saturation curve - SC) (рисунок 6.28).

Первая граница ("BC") соответствует равновесию (химическому, ионизационному и фазовому) жидкого диоксида урана стехиометрического состава, $UO_{2.0}$, с нестехиометрической (обогащенной кислородом) паровой фазой, UO_{2+x} ($x \geq 0$). Динамически это соответствует режиму медленного, полностью термодинамически равновесного испарения $UO_{2.0}$, наиболее близкому к режиму, который действительно может реализоваться в процессе гипотетической аварии на ядерном реакторе. Вторая граница ("SC"), напротив, соответствует равновесию уже паровой фазы стехиометрического состава, $UO_{2.0}$, с нестехиометрическим (кислородо-обедненным) жидким UO_{2+x} ($x \leq 0$).

Динамически это соответствует режиму сверхбыстрого принудительно-конгруэнтного режима лишь частично равновесного испарения, при котором стехиометрия пара не успевает измениться при испарении ("Forced Congruent Mode" - FCM) [174].

Непосредственным следствием неконгруэнтного характера испарения в диоксиде

урана является примечательно высокий уровень максимального давления паров, теоретически предсказываемого [40] на кривой кипения ($p_{\max} \sim 1 \text{ ГПа}$) (рисунок 6.28).

Другим важным следствием, предсказываемым настоящей теорией [40], [217], является чрезвычайно высокая степень максимального кислородного обогащения паровой фазы, находящейся в равновесии с кипящим диоксидом урана стехиометрического состава, $UO_{2.0} \{ \max(O/U)_{BC} \sim 7 \text{ при } T \sim 8000 \text{ K} \}$ (рисунок 6.27).

Еще одним важным следствием, предсказываемым настоящей теорией, является необычная (аномальная) форма фазовой диаграммы неконгруэнтного испарения в координатах энтальпия-температура, существенно отличная от аналогичной $H - T$ диаграммы испарения "обычных" веществ (рис. 6.29). Наиболее яркой особенностью здесь является резко немонотонная зависимость от температуры для аналога теплоты испарения, величины $Q_{\text{vap}} \equiv H(T)_{\text{vap}} - H(T)_{\text{liquid}}$. Все перечисленные выше особенности являются крайне важным для приложений, связанных с проблемой ядерной безопасности [221].

Достоинством теоретического подхода, используемого в работах [221], [40], [217], является возможность единого и самосогласованного описания УРС сильно взаимодействующей системы уран-кислород в окрестности истинной критической точки неконгруэнтного фазового перехода. Свойства этой критической точки, как и весь фазовый переход в целом, принципиально отличаются от свойств критической точки "обычного" фазового перехода газ-жидкость, которой соответствует выполнение стандартных отношений: $[(\partial p / \partial V)_T = (\partial^2 p / \partial V^2)_T = 0, (\partial^3 p / \partial V^3)_T < 0]$. В частности, изотермическая сжимаемость системы в критической точке неконгруэнтного фазового перехода не стремится к бесконечности, а оказывается близкой к идеально-газовому значению, $(\partial \ln p / \partial \ln V)_T \sim 1 \neq 0$. Определяющим же признаком критической точки неконгруэнтного фазового перехода является потеря положительной определенности матрицей $\|\partial \mu_i / \partial n_j\|$ (μ_i и n_i - химический потенциал и концентрация i -того сорта частиц). Настоящая модель предсказывает следующие параметры этой критической точки:

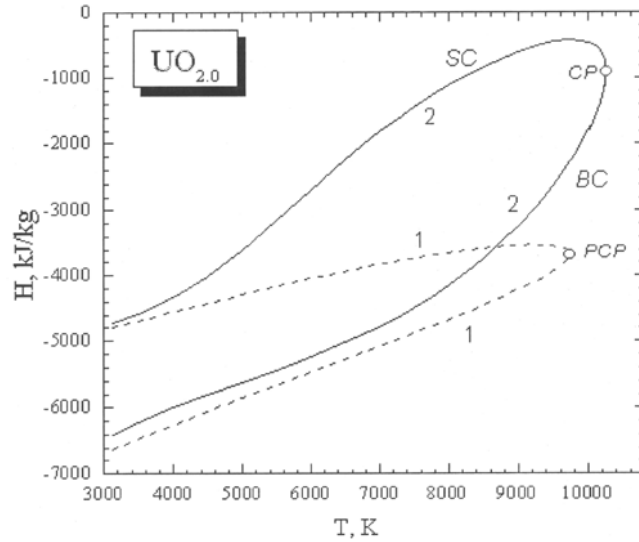


Рис. 6.29: Фазовая диаграмма энтальпия - температура для неконгруэнтного испарения диоксида урана ($UO_{2.0}$) 1 - граница двухфазной области диоксида урана, описываемого в представлении мономолекулярной системы взаимодействующих молекул UO_2 (стандартный тип фазовой диаграммы с псевдо-критической точкой (PCP)), 2 - истинная граница двухфазной области неконгруэнтного испарения с кривой кипения (BC), кривой насыщения (SC) и истинной критической точкой (CP) по результатам настоящей работы [221], [40], [217].

$$T_{\text{кр}} \approx 10120 \text{ K}, p_{\text{кр}} \approx 965 \text{ МПа}, \rho_{\text{кр}} \approx 2.61 \text{ г/см}^3, S_{\text{кр}} \approx 1.84, \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{K}}, c_p \approx 1.8 \frac{\text{кДж}}{\text{кг} \cdot \text{K}}$$

$$\beta_T \equiv \rho^{-1} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_T \approx 10^{-4} [1/\text{bar}], \quad \alpha_p \equiv \rho^{-1} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \approx 5.1 \cdot 10^{-4} [1/K], \quad \Gamma \approx 1.$$

Таким образом, на основе единого теоретического представления ("химической модели плазмы") возможно построение модели неконгруэнтного фазового равновесия (испарения) в высокотемпературных продуктах нагрева диоксида урана, как в многокомпонентной, частично ионизованной, сильно взаимодействующей смеси атомов, молекул и атомных и молекулярных ионов. На основе теоретической модели создан эффективный численный алгоритм, реализованный в рамках универсального машинного кода "SANA-IV", позволяющий находить параметры смеси в условиях одновременного химического, ионизационного и фазового равновесия. Расчет существенно опирается на результаты В.С. Юнгмана, Л.Н. Горохова и других сотрудников отдела термодинамики ИТЭС ИВТАН, критически переработавших в рамках ИНТАС-проекта совокупность термохимических констант и идеально-газовых свойств (т.наз. "индивидуальных" термодинамических функций [43]) для всего набора атомов, молекул и ионов рассматриваемой системы уран-кислород [221]. Выбранный подход позволил впервые корректно воспроизвести общую структуру фазовой границы в продуктах нагрева диоксида урана, по многим признакам радикально отличающуюся от аналогичной структуры фазовой границы испарения "обычных" веществ. Полученные результаты помимо общезначимого интереса имеют важное прикладное значение в свете проблемы безопасности ядерной энергетики.

Литература

- [1] Альтшулер Л.В., УФН, 140(2), 177, (1983)
- [2] Андропов Л.И. Теоретическая электрохимия. М.: Высшая школа, 1969.
- [3] Ашкрофт Н., Мермин Н., "Физика твердого тела", М., МИР, 1979
- [4] Адамсон А. Физическая химия поверхностей (пер.с англ.) М.: МИР, 1979
- [5] Аврорин Е.Н., Водолага Б.К. и др., Письма ЖЭТФ, 43(5), 241 (1986).
- [6] Альтшулер Л.В., Бушман А.В. и др. ЖЭТФ 78(2) 741 (1980)
- [7] Альтшулер Л.В., Брусникин С.Е., Марченко А.И. ТВТ, 27(4), 636, (1989).
- [8] Аврорин Е.Н., Водолага Б.Н., Симоненко В.А., Фортов В.Е., УФН, 163(5), 1, (1993).
- [9] Базаров И.П., ЖЭТФ, 32, 1065, (1957)
- [10] Базаров И П, Термодинамика, М. Высшая школа, 1976.
- [11] Базылев Б.Н., Боровик Ф.Н., Романов Г.С., Вергунова Г.А., Квантовая электроника, 13(10), 1981, (1986).
- [12] Байбуз В.Ф., Зицерман В.Ю. и др., Химическое равновесие в неидеальных системах (Под. ред. Юнгмана В.С.) М.: ИВТАН, 1986.
- [13] Беспалов В.Е., Грязнов В.К., и др. ЖЭТФ, 69, 2059 (1975).
- [14] Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике, М., Гостехиздат, (1946)
- [15] Бушман А.В., Фортов В.Е. УФН, 140, 177 (1983).
- [16] Бушман А.В., Ломакин Б.Н., Сеченов В.А. и др., ЖЭТФ, 69, 1524, (1975).
- [17] Бушман А.В., Фортов В.Е., УФН, 140(2), 177,(1983).
- [18] Веденов А.А., Ларкин А.И., ЖЭТФ, 36, 1133, (1959).
- [19] Воронцов - Вельяминов П.Н., Часовских В.П. ТВТ, 18, 1153, (1975).
- [20] Владимиров А.С., Волошин Н.П., и др., ЖЭТФ, 39(2), 69 (1984).
- [21] Волф Дж. Термодинамика экситонов в полупроводниках, сб. "Физика за рубежом" 125 (1983)

- [22] Воропинов А.И., Гандельман Г.М., Подвальный В.Г., УФН, 100, 193, (1970).
- [23] Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам веществ, 1972.
- [24] Гиршфельдер Дж., Кертис К., Берд Р., Молекулярная теория жидкостей и газов, М., ИИЛ, 1961.
- [25] Глауберман А.Е., Юхновский И.Р., ЖЭТФ, 22, 562, (1952).
- [26] Гомбаш П. Статистическая теория атома. М.: ИИЛ, 1951.
- [27] Григорьев Ф.В. Кормер С.Б. и др. Письма ЖЭТФ 16 286 (1972), ЖЭТФ 75 1683 (1978),
- [28] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Численные методы механики сплошной среды, 4, 166, (1973).
- [29] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. Фортов В.Е., ПМТФ, N3, 70, (1973).
- [30] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., в сб. Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы, Ред. В.М.Иевлев, Наука, М., 1976, с.25.
- [31] Грязнов В. К., Жерноклетов М.В., Зубарев В.Н., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. ЖЭТФ, 78, 573 (1980).
- [32] Грязнов В. К., Иосилевский И. Л., Красников Ю. Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б. Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е. Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора (Под ред. Иевлева В.М.) (М.: Атомиздат,1980).
- [33] Грязнов В.К., Термодинамические свойства сильносжатых высокотемпературных сред, Диссертация, ИХФ АН СССР, Черногловка, 1981.
- [34] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Письма ЖТФ, 1982, т.22, N8, с.1376.
- [35] Грязнов В.К., Фортов В.Е., ТВТ, 25(6), 1208, (1987).
- [36] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е. Расчет ударных адиабат металлов в химической модели плазмы, ("Физика и техника плазмы", Минск, БГУ, (1994) 1).
- [37] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Термодинамический расчет ударных адиабат пористых металлов, в сб.: Уравнения состояния, ред.Фортов В.Е., Москва, 1995, с. 38.
- [38] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Расчет термодинамических свойств ударно-сжатой плазмы металлов, в сб.: Физика низкотемпературной плазмы, Петрозаводск, с.105, (1995)
- [39] Грязнов В.К., Жерноклетов М.В. Иосилевский И.Л. и др., ЖЭТФ, 108, 70, (1998).

- [40] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. и др. Уравнение состояния диоксида урана, Известия РАН, Серия физическая. 63(11), с. 2258 (1999), Final Reports of Project INTAS-93-66 (1997, 1999), European Commission, JRC-ITU, Karlsruhe, Germany.
- [41] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Фортов В.Е., Термодинамика ударно-сжатой плазмы в представлениях химической модели ("Ударные волны и экстремальные состояния вещества" Ред. В.Е.Фортов, Л.В.Альтшулер, Р.Ф.Трунин, А.И.Фунтиков, М.: Наука, 2000, с.342.)
- [42] Гугенхейм Е., Современная термодинамика изложенная по методу У.Гиббса, ГХИ, Москва, 1941.
- [43] (Гурвич Л.В. и др. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справочник, М.: Наука, 1982), L.V.Gurvich, V.S.Iorish et al. IVTANTHERMO - Thermodynamic Database, CRC Press, Inc. 1993.
- [44] Дайсон Ф. Устойчивость вещества, в книге "Устойчивость и фазовые переходы" (М.: Мир, 1973) с.15
- [45] Дихтер И.Я., Зейгарник В.А., ТВТ, 15(3), 471, (1977).
- [46] Дубовицкий В.А., Красников Ю.Г., Павлов Г.А., Математическое моделирование 5(11) 53 (1993).
- [47] Жуховицкий Д.И., Храпак А.Г., Якубов И.Т. Химия плазмы, Под ред. Б.М. Смирнова. М.: Энергоиздат, 1984. Вып. II. с.130.
- [48] Займан Дж., Вычисление блоховских функций, М.: МИР, 1977.
- [49] Зеленер Б.В., ТВТ, 15, 893, (1977).
- [50] Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С., ТВТ, 11, 922, (1973), 12, 20, (1974), 13, 712, (1975), 13, 913, (1975)
- [51] Зеленер Б.В., Норман Г.Э., Филинов В.С., ТВТ, 10(6), 1160, (1972).
- [52] Зельдович Я.Б., ЖФХ, 11(5), 685 (1938).
- [53] Зельдович Я.Б., ЖЭТФ, 32, 1577, (1957).
- [54] Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П., Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений, М, Наука, (1968), Альтшулер Л.В., УФН, 85, 197, (1965).
- [55] Зубарев В.Н., Подурец М.А. и др. в сб.: Детонация, Черногловка, 1978, с.61.
- [56] Иванова А.Н., Грязнов В.К. Расчет атомов по методу Хартри-Фока, Отчет ИХФ АН СССР, Черногловка, 1975, 54с.
- [57] Иевлев В.М. Известия АН СССР, Серия Энергетика и транспорт. 6(6), 24 (1977).
- [58] Иосилевский И.Л., Грязнов В.К. Методика термодинамического расчета неидеальной плазмы: НТО НИИТП № 2851, ГОНТИ-8, (1971), НТО НИИТП № 6929 ГОНТИ-8, (1974), Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы. Ред. В.М.Иевлев, М., Наука, (1976) 25.

- [59] Иосилевский И.Л. Термодинамические свойства неидеальной плазмы, НТО НИИ-ИТП № 27405, ГОНТИ-8, Москва, 1972
- [60] Иосилевский И.Л., Кузнецова Н.И., Сборник "Ракетная и космическая техника", серия IV (вып. 25-26), ГОНТИ-8, 341 (1975).
- [61] Иосилевский И.Л., Термодинамические свойства неидеальной плазмы, НТО НИИ-ИТП № 06659, ГОНТИ-8, Москва, 1977.
- [62] Иосилевский И.Л., Термодинамические свойства продуктов нагрева гексафторида урана. НТП НИИИТП № 9165, ГОНТИ-8, Москва, 1979.
- [63] Иосилевский И.Л., ТВТ, 18(3), 355, (1980).
- [64] Иосилевский И.Л., Фазовые переходы в кулоновских моделях, (сб. "Уравнение состояния в экстремальных условиях", Новосибирск, 1981, с.20).
- [65] Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., ТВТ, 19(6), 1121, (1981).
- [66] Иосилевский И.Л. ТВТ, 23(6), 1041, (1985).
- [67] Иосилевский И.Л. Приближение ЛТР и аномалии в равновесном профиле пространственного заряда ("Исследования вещества в экстремальных условиях", Ред. В.Е.Фортов, Москва, Изд-во ИВТАН, 1990, 10).
- [68] Иосилевский И.Л. О критических параметрах га-жидкость в металлах, ("Исследования вещества в экстремальных условиях", Ред. В.Е.Фортов, Москва, Изд-во ИВТАН, 1991, 106).
- [69] Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю., ("Уравнение состояния", /ред. В.Е.Фортов/, 1995, Москва, 26).
- [70] Иосилевский И.Л., Чигвинцев А.Ю., Электростатика фазовой границы в кулоновских системах (сб."Плазма, XX век" Изд. ПГУ, 1998, с.474).
- [71] Иосилевский И.Л. Сессия РАН по неидеальной плазме, Москва, 1999.
- [72] Иосилевский И.Л., Общая характеристика термодинамического описания низкотемпературной плазмы, Энциклопедия низкотемпературной плазмы, т.I, Под ред. В.Е.Фортова, НАУКА, (2000) с.275.
- [73] Иосилевский И.Л. Старостин А.Н., Проблема термодинамической устойчивости в низкотемпературной плазме, "Энциклопедия Низкотемпературной Плазмы", т.I, Под ред.В.Е.Фортова, НАУКА, 2000, с.327.
- [74] Иосилевский И.Л. О критических параметрах перехода газ-жидкость в металлах, (сб."Вещество в экстремальных условиях", Ред. В.Е.Фортов, ИВТАН, М., 106 (1991)), Труды конференции ФНТП-2001, Петрозаводск (2001), 117, Int. Conference "Physics of Nonideal Plasmas", Greifswald, 2000.
- [75] Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., Фортов В.Е. Термодинамика плотного водорода (дейтерия) (сб."Физика экстремального состояния вещества" ИХПФ, Черноголовка, 2001 с.114), Int. Conference "Physics of Nonideal Plasmas", Greifswald, 2000.

- [76] Иосилевский И.Л. Обобщенная "холодная кривая" вещества (сб. "Физика экстремального состояния вещества" ИХПФ, Черногоровка, (2001) 116, Int. Conference "Physics of Nonideal Plasmas", Greifswald, 2000.
- [77] Исихара А. Статистическая физика. М.: Мир, 1973.
- [78] Калиткин Н.Н., Ритус И.В., Миронов А.М., Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов, Препринт N 46 ИПМ АН СССР, М., 1983.
- [79] Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Модели неидеальности плазмы, Препринт ИПМ АН СССР N 16, М., 1989, 38с. 67.
- [80] Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Квантово-статистические уравнения состояния и ударные адиабаты, Препринт ИПМ АН СССР N14, М., 1976.
- [81] Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Ритус И.В., Квазизонная интерполяция термодинамических Функций, Препринт N 30, ИПМ АН, М., 1988.
- [82] Киржниц Д.А. ЖЭТФ, 38, 503, (1960).
- [83] Кац М. Уленбек Дж. Хеммер П. Теория Ван-дер-Ваальса равновесия газ-жидкость (в кн. М.Кац "Вероятность и смежные вопросы в физике" (пер.с англ.)) М., МИР, 1965, с.271.
- [84] Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. УФН, 117(1), 3, (1975).
- [85] Киржниц Д.А., Шпатаковская Г.В. Усовершенствованная статистическая модель Томаса-Ферми, Препр. ФИАН № 33 (1998).]
- [86] Копышев В.П., ЖЭТФ, 55, 1215,(1968).
- [87] Копышев В.П., О термодинамике ядер одноатомного вещества, Препринт N59 ИПМ АН СССР, М., 1978, Численные методы механики сплошной среды, 8(6), 54, (1977).
- [88] Копышев В.П., ПМТФ, № 1, 119, (1971).
- [89] Копышев В.П., Хрусталева В.В. ПМТФ № 1 122 (1980)
- [90] Копышев В.П., Урлин В.Д. Уравнение состояния водорода до давления 1 ТПа, "Ударные волны и экстремальные состояния вещества" (Ред. В.Е.Фортон, Л.В.Альтшулер, Р.Ф.Трунин, А.И.Фунтиков) (М.: Наука, 2000) с.297.
- [91] Красников Ю.Г., ЖЭТФ, 53, 2223,(1967).
- [92] Красников Ю.Г., ЖЭТФ, 73, 516, (1977)
- [93] Крокстон К. Физика жидкого состояния (пер. с англ.) М.: МИР, 1978.
- [94] Кубо Р., Термодинамика, М. МИР, 1970.
- [95] Кудрин Л.П., Статистическая физика плазмы (М. Атомиздат, 1974)
- [96] Кожевников В.Ф., ЖЭТФ, 97(2), 541, (1990).
- [97] Ландау Л.Д., Зельдович Я.Б. ЖЭТФ, 14, 32, (1944).

- [98] Ландау Л Д, Лифшиц ЕМ Статистическая физика, М.: Наука, 1964.
- [99] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Электродинамика Спл. Сред, Наука, 1982.
- [100] Ларкин А.Н. ЖЭТФ, 38, 1896, (1968).
- [101] Ликальтер А.А. ЖЭТФ, 56, 240, (1969)
- [102] Ликальтер А. А. УФН, 162, 119, (1992).
- [103] Ликальтер А.А. ДАН СССР, 269, 96, (1981), УФН, 170, 831, (2000).
- [104] Ликальтер А.А. УФН, 162, 120 (1992), ЖЭТФ, 113, 1094, (1998).
- [105] Ломакин Б.Н., Фортов В.Е. ЖЭТФ, 63, 92 (1972).
- [106] Ломакин Б.Н., Иосилевский И.Л., Грязнов В.К., Исследование уравнения состояния неидеальной плазмы цезия, НТО НИИТП № 7117, ГОНТИ-8, Москва, 1974.
- [107] Ломоносов И.В., Докторская диссертация, ОИХФ, Черноголовка, 2000.
- [108] Максимов Е.Г., Шилов Ю.И. УФН, 169, 1223, (1999).
- [109] Мартынов Г А, Саркисов Г Н. ДАН СССР 260 1348 (1981), ДАН СССР 358 329 (1998)
- [110] Медведев А.Б., В сб., Вопросы атомной науки и техники. Теоретическая и прикладная физика, 1990, N1, с.23.
- [111] Мейерович Б.Э. ЖЭТФ 68(6) 1983 (1975), УФН 149(2), 221, (1986), "Канал сильного тока", М: ФИМА, 1999.
- [112] Мейерович Б.Э. Конференция "Уравнение состояния вещества" Эльбрус, 1986.
- [113] Мейсон Э., Сперлинг Т., Вириальное уравнение состояния, "Мир", 1972.
- [114] Минцев В.Б. Фортов В.Е., Письма ЖЭТФ, 30, 401, (1979)
- [115] Монарха Ю.П., Шикин В.Б. Физ. Низких Темп. 8(6), 563, (1982).
- [116] Норман Г.Э. ЖЭТФ 60(5), 1686, (1971).
- [117] Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б., в сб., ВАНТ. Методы и программы математической физики, 1979, N4, с.16.
- [118] Новиков В.Г., ТВТ, 25(1), 1, (1987).
- [119] Новиков В.Г., Ударное сжатие лития алюминия и железа по модели МХФС. Препринт ИПМ АН СССР N133, М., 1985.
- [120] Норман Г.Э., Старостин А.Н. Журнал прикладной спектроскопии XIII 1, 149 (1970).
- [121] Норман Г.Э., Замалин В.М., Филинов В.С., Метод Монто-Карло в статистической термодинамике, М:, Наука, 1977.

- [122] Норман Г.Э., Старостин А.Н. ТВТ, 8, 413 (1970).
- [123] Рюэль Д. Статистическая механика. Строгие результаты, М. МИР, 1971.
- [124] Савукинас А.Ю., Чижюнас А.З., Литовский физ. сборник, 14, 73, (1974).
- [125] Семенов А.М., Шпильрайн Э.Э., в сб. Уравнение состояния газов и жидкостей, М.: Наука, 1975.
- [126] Симоненко В.А., Волошин Н.П., и др., ЖЭТФ, 88(4), 1452, (1985).
- [127] Синько Г.В, Числ. Методы Мех. Спл. Среды, 10, 124, (1978), ТВТ, 21(6), 1041, (1983).
- [128] Свойства конденсированных веществ при высоких давлениях и температурах, /Ред. Р.Трунин, ВНИИЭФ, Саров, 1992
- [129] Сенченков А.П. Исследование свойств металлического пара и плотной плазмы при высоких температурах и давлениях, Докторская дисс. Москва, ИАЭ, 1976
- [130] Скрипов В.П., Сеницын П.А. и др. Теплофизические свойства жидкостей в метастабильном состоянии (М.: Атомиздат, 1980)
- [131] Справочник физических величин, под ред. И.К.Кикоина, Москва, Атомиздат, 1976
- [132] Стишов С.М. Письма в ЖЭТФ, 67(1), 82, (1998)
- [133] Теория простых жидкостей, Ред. Д.Рашбрук, М.:МИР, 1971.
- [134] Теория неоднородного электронного газа, Ред. С.Лундквист и Н.Марч, М.: МИР, 1987.
- [135] Юнгман В.С., Горохов Л.Н., Final Report INTAS-93-66, JRC-ITU, Karlsruhe, (1997), Термодинамические свойства веществ т.IV, ред. В.П. Глушко, М., Наука, 1982,
- [136] Тиходеев С.Г. Электрон-дырочная жидкость в полупроводниках УФН, 145, 3, (1985).
- [137] Трунин Р.Ф., Симаков Г.В. и др., ЖЭТФ, 96(3), 1024, (1989).
- [138] Трунин Р.Ф., Симаков Г.В. и др., ЖЭТФ, 76, 1090, (1993).
- [139] Трунин Р.Ф., Симаков Г.В. Панов Н.В. ТВТ, 39(3), 430, (2001).
- [140] Ударные волны и экстремальные состояния вещества, Ред. В.Е.Фортов, Л.В.Альтшулер, Р.Ф.Трунин, А.И.Фунтиков, М.: Наука, (2000).
- [141] Фейнман Р., Статистическая механика (М. МИР, 1975) (пер. с англ)
- [142] Физика простых жидкостей, Ред. Г.Темперли, Дж.Роулинсон, Дж.Рашбрук, т.1,2, М.:Мир, 1973.
- [143] Физическая Энциклопедия, Москва, Изд.Энциклопедия, 1990

- [144] Фортов В.Е., Красников Ю.Г. ЖЭТФ 59(11), 1646, (1970)
- [145] Фортов В.Е., Ломакин Б.Н., Красников Ю.Г., ТВТ, 9(5), 869, (1971).
- [146] Фортов В.Е., Дремин А.Н. Физика горения и взрыва №5 743 (1973)
- [147] Фортов В.Е., Дремин А.Н., Леонтьев А.А., ТВТ, 13(5), 1072, (1975).
- [148] Фортов В.Е., А.А.Леонтьев, А.Н.Дремин, В.К.Грязнов, ЖЭТФ, 71, 225, (1976).
- [149] Фортов В.Е., Якубов И.Т., Физика неидеальной плазмы, ОИХФ, Черногловка, 1982.
- [150] Фортов В.Е., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы, М.: Атомэнергоиздат, 1994.
- [151] Фортов В.Е., Терновой В.Я. и др. Письма в ЖЭТФ, 69(12), 874, (1999).
- [152] Хартри Д., Расчеты атомных структур, ИИЛ, 1960.
- [153] Хилл Т., Статистическая механика, ИИЛ, М., 1960.
- [154] Хуанг К. Статистическая механика, М: Мир, 1966.
- [155] Храпак А.Г., Якубов И.Т., ЖЭТФ, 19(3), 946, (1970)
- [156] Шапиро С., Тьюколски С. Чёрные дыры, белые карлики и нейтронные звёзды, М.: МИР (1985) 256.
- [157] Шпатаковская Г.В., "Оболочечные эффекты в уравнении состояния холодного сильносжатого вещества", Препринт ИПМ АН СССР N 54, М., 1975., ТВТ, 27, 677 (1989).
- [158] Шпильрайн Э.Э., Фомин В.А., Качалов В.В. ТВТ, 26(5), 892, (1986).
- [159] Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твёрдом теле (М.: Мир, 1979).
- [160] Энциклопедия Низкотемпературной Плазмы, т.1, Под ред.В.Е.Фортова, НАУКА, 2000.
- [161] Плазма с конденсированной фазой (Энциклопедия низкотемпературной плазмы, Ред. В.Е.Фортов, НАУКА, 2000. т. III. с. 138.
- [162] Ядерные двигатели и энергоустановки, Под ред. А.С.Коротеева, М.:Машиностроение, (2001) 450с.
- [163] Якуб Е.С. Журнал Физической Химии. 60, 2184, (1986), Molecular Physics 77, 845, (1992), ТВТ, 14, 893, (1976).
- [164] Якуб Е.С. ТВТ, 28, 664 (1990), Физ.Низких Темп., 19, 377 (1993), Low Temp. Phys. 20, 579 (1994), Physica B, 265, 31, (1999).
- [165] Abe R. Progr. Theor. Phys. 22, 213, (1959).
- [166] Alastuey A., et al., in Physics of Strongly Coupled Plasmas, /ed. H.M.Van Horn & S.Ichamaru/, University of Rochester Press, 1993, 91.

- [167] Alder B.J., Wainright T.E., J.Chem.Phys. 265, 1439, (1960).
- [168] Ashcroft N.W., J. Leckner, Phys.Rev., 145, 83, (1966).
- [169] Barker J.A, Henderson D.H, Reveiws in Modern Physics, 48, 588 (1976).
- [170] Barker J., Henderson D., J. Chem. Phys. 47, 4714, (1967), L.Verlet, J.Weiss, Molec. Phys. 26, 1013, (1976).
- [171] Baus M., Hansen J.P. Phys. Report, 59(1), 1, (1980).
- [172] Beule B., Ebeling W., Foerster A. et al. Phys.Rev. B, 59, 14177 (1999),
- [173] Brush S., Sahlin H. and Teller E., J. Chem. Phys., 45, 2102, (1966).
- [174] Bober M., Breitung W., et al. Journal of Nuclear Materials. 60, 20, (1976).
- [175] Ballone P., Senatore G., Tosi M., Nuovo Cim. 65, 293, (1981).
- [176] Bober M., Singer J., Nuclear Science & Engineering. 97, 344, (1987).
- [177] Breitung, W. and Reil, K.O. Report KfK 3939 (Karlsruhe, Germany, 1985), Nucl.Sci.Eng. 101 26 (1989)
- [178] Ceperley D. Alder B., Phys. Rev. Lett. 45, 566, (1980), Jones M. Ceperley D. Phys.Rev.Lett. 76, 4572, (1996).
- [179] Cauble R., Perry T, et al. Prys. Rev. Lett. 80 1250 (1998)
- [180] Chabrier G., Ap. J. 414, 695, (1993).
- [181] Caillol J. J.Chem.Phys. 99, 8953, (1993)
- [182] Clerouin J., Zerah G. in "Strongly Coupled Plasma Physics", /Ed. by H.M.Van Horn and S.Ichimaru/, Univ. of Rochester Press, 1993, p.455.
- [183] Collins L. Kwon I. et al. Phys.Rev E, 52, 6202, (1995), Phys.Rev B 55, 907, (1997).
- [184] Da Silva L.B. Phys. Rev. Let. 78 483 (1997)
- [185] DeDominisis C, J.Math.Phys. 3, 983, (1962), J.Math.Phys. 4, 955, (1963),
- [186] Deutch C., Furutani Y., Gombert M.M. Phys. Report, 69(2), 85, (1981).
- [187] Dienemann H, Clemens G, Kraeft W D Annalen der Physik 37(6), 444 (1980).
- [188] Ebeling W. , Physica, 43, 293, (1969).
- [189] Ebeling W., Ann.Phys. 19, 104, (1967)
- [190] Ebeling W., Physica. 73, 573, (1974).
- [191] Ebeling W., Foerster A., Reichert W., Physica A, 150, 159, (1988).
- [192] Ebeling W., Foerster A., Fortov V., Gryaznov V., Polishuk A. Thermophysical Properties of HOT Dense Plasmas (Teubner, 1991), Ebeling W. Physica, 43, 293 (1969).

- [193] Ferrel R A, Phys.Rev.Lett. 1, 443, (1958)
- [194] Fischer E.A. Reports KfK №№ 4084 (1987), 4889 (1992), Karlsruhe, Journal of Nuclear Science and Engineering. 101, 97, (1989).
- [195] Fortov V.E., Gryaznov V.K., Iosilevski I.L. Equation of State of Shock Compressed Plasmas, in: Strongly Coupled Plasma, Plenum Press, N-Y, 1997 p.297.
- [196] Gell-Mann M, Bruckner K A, Phys.Rev. 106, 364, (1957).
- [197] Graboske H.C., Harwood D.J., Rogers. F.J., Phys.Rev. 1986, 210, (1969).
- [198] Green D. and Leibovitz L.J., Journal of Nuclear Materials. 105, 184, (1982).
- [199] Gillan M., Mol.Phys. 49, 421, (1983).
- [200] Guissani Y., Guilliot B. J.Chem.Phys. 101(1), 490, (1994).
- [201] Gryaznov V.K., Iosilevski I.L., Fortov V.E., Calculation of Porous Metal Hugoniots, in: Physics of Strongly Coupled Plasmas, ed.W.D.Kraeft, M.Schlangles, World Scientific, 1996, p.277.
- [202] Gryaznov V.K., Iosilevski I.L. et al. Ionic Model for Liquid Uranium Dioxide, ("Physics of Strongly Coupled Coulomb Systems", /Eds. G.J. Kalman, K.B. Blagoev, J.M. Rommel/, Plenum Press, (1998), 147.
- [203] Gryaznov V.K., Iosilevskii I.L., Fortov V.E., Contrib. Plasma. Phys., 39, 89 (1999).
- [204] Gryaznov V.K., Iosilevski I.L. et al. Ionic Model for Liquid Uranium Dioxide ("Strongly Coupled Coulomb Systems", /Eds. Kalman G., Blagoev K., and Rommel M./, Plenum Press, NY-London, 1998, p. 147), Gryaznov V.K., Iosilevski I.L. et al. Journal de Physique IV, 10 Pr5, 363, (2000).
- [205] Harris C. M., Trulio J., Roberts J., Phys.Rev., 119, 1832, (1960).
- [206] Hoover W.G., Stell G. et al., J.Chem.Phys. 63, 5434, (1975).
- [207] Hansen J.P., Phys. Rev. 8A, 3096, (1973), Baus M. and Hansen J.P., Phys. Rep. 59, 1, (1980).
- [208] Jungst S, Knuth B, Hensel F, Phys.Rev.Lett. 55, 2160, (1985).
- [209] Hubburd W.B. Plasma thermodynamics and the evolution of brown dwarfs and planetesimals (in "Strongly Coupled Plasma Physics", S.Ichimaru ed. Elsevier, 1990) p.21.
- [210] Hess H., Kaschnitz E., Pottlacher G., High Pressure Research, 12, 29, (1994).
- [211] Ichimaru S. Rev. Mod. Phys. 54(4), 1017, (1982).
- [212] Ichimaru S. Rev Mod. Phys. 65, 255 (1993).
- [213] Ichimaru S., Yyetomi H., Tanaka S. Phys. Reports, 149, 91, (1987).
- [214] Iosilevski I., Chigvintsev A. Phase Transition in Simplest Plasma Models (in "Physics of Nonideal Plasmas" Eds. W.Ebeling, A. Forster, R.Radtke, Teubner (1992) p.87).

- [215] Iosilevski I., Chigvintsev A., in "Physics of Strongly Coupled Plasmas", Eds W.Kraeft and M.Schlages, World Scientific, (1996) 145.
- [216] Iosilevski I.L., Chigvintsev A.Yu., in "Physics of Strongly Coupled Coulomb Systems", /ed. G.J.Kalman, K.B.Blagoev, J.M.Rommel /, Plenum Press, (1998) 135.
- [217] Iosilevski I.L., Hyland G.J. et al. Trans. Amer. Nucl. Soc., 81, 122, (1999), Int. Journ. Thermophys, 22, 1253, (2001).
- [218] Iosilevski I. and Chigvintsev A., Journal de Physique IV France, 10, Pr5-451, (2000).
- [219] Iosilevski I.L. Thermodynamic Properties of Gaseous Pasma in Zero-Temperature Limit (Conference "Physics of Nonideal Plasmas", Greifswald, 2000).
- [220] Isihara A, J.Phys. A 1, 539, (1968).
- [221] Final Reports of Project INTAS-93-66 (1997, 1999), European Commission, JRC-ITU, Karlsruhe, Germany.
- [222] Jones M. and Ceperley D., Phys. Rev. Lett. 76, 4572 (1996).
- [223] Kalbaum T., Foerster A., Fluid Phase Equilibria, 76, 71, (1992)
- [224] Kelbg G., Ann.Phys. 12, 4, (1963).
- [225] Kleban P., Puff R.D. Phys. Lett. 31A, 340, (1970).
- [226] Kerley G.I., Los Alamos National Laboratory, Report LA - 4776, 1972, // J. Chem. Phys. 73, 460, (1980).
- [227] Knaup M., Reinhard P., Topffer C. Contrib.Plasma Phys. 39, 57, (1999).
- [228] Kohn W, Density Functional Theory in 1997, "Strongly Coupled Coulomb Systems" /ed.by.Kalman G.J., Rommel J.M., Blagoev K., NY-London, Plenum Press, 1998)
- [229] Kopyshv V.P., Sov.Tech.Review, B, 4, 39, (1992).
- [230] Letter R., Phys.Rev., 99, 1854, (1955).
- [231] Lebowitz J.L. and Lieb E.H., Phys. Rev. Lett. 22(13), 631, (1969).
- [232] Lebowitz J.L. and Lieb E.H., Advances in Math. 9, 317, (1972).
- [233] Lenosky Th. J., Kress J.D., Collins L.A., Kwon J., Phys. Rev. E, 54, 2844, (1996), JQSRT 58(4-6), 743, (1997), Phys. Rev. B 55, 18, 907, (1997), Phys. Rev. B56, 5164, (1997).
- [234] Larsen B. J.Chem.Phys. 65(9), 3431, (1976).
- [235] Levesque D, Weiss J and Realto L. Phys.Rev.Lett. 54, 451, (1985)]
- [236] Levin Y., Fisher M.E. Physica A 225, 164, (1996), Fisher M.E. J. Stat. Phys., 75, 1, (1994).
- [237] Margo W.R., Ceperley D.M., Pierleoni C., Bernu B., Phys. Rev. Lett. 76, 1240, (1996).

- [238] Meeron E. J.Chem.Phys. 28, 630, (1958).
- [239] Morita T. Progr.Theor.Phys., 22(6) 757, (1959).
- [240] McQuarrie D.A. J. Phys. Chem. 66, 1508, (1962).
- [241] Mazo R.M. J.Math.Phys. 8, 1546, (1967).
- [242] Mansoori C.F., Carnahan V., Starling K.E., Leland T.W., J.Chem.Phys., 54, 1523, (1971).
- [243] Militzer B., Ceperley D. PhysRev.Lett. 85, 1980, (2000).
- [244] Mochkovitch R. and Hansen J.P., Phys. Let. 73A, 35, (1979).
- [245] Morita T., Progr.Theor.Phys. 20, 920, (1958).
- [246] Mostovich A.N., Chan Y. et al. Phys. Rev. Lett. 85 3870 (2000)
- [247] Nellis W J, Van Thiel, Mitchel A C, Phys.Rev.Let. 48, 816, (1982).
- [248] Nellis W J, Weir S T, Mitchel A C, Phys.Rev.Let. 76, 1860, (1986).
- [249] Collins G., Cellers P. et al. Phys.Rev.Let. 87 165504 (2001)
- [250] Ohse R.W., Babelot J-F. et al., Journal of Nuclear Materials. 130, 165, (1985).
- [251] Okubo S, Isihara A, Physica 57, 421, (1972).
- [252] Plank M, Ann.der Phys. 75, 673, (1924).
- [253] Pollock E.L. and Hansen J.P. Phys. Rev. A8, 3110, (1973).
- [254] Physics of Strongly Coupled Plasmas, /ed.W.D.Kraeft, M.Schlanges, World Scientific, 1996.
- [255] Physics of Nonideal Plasmas, /ed. W.Ebeling, A. F(rster, R.Radtke/, Teubner, 1992.
- [256] Physics of Strongly Coupled Plasmas, /ed. H.M.Van Horn & S.Ichimar/, University of Rochester Press, 1993
- [257] Pierleoni C., Magro W., Ceperley D., Bernu B., in Physics of Strongly Coupled Plasmas, /ed.W.D.Kraeft & M.Schlanges, World Scientific, 1996, p.11, Phys.Rev.Let.,76, 1240,(1996).
- [258] Panagiotopoulos A.Z., Fluid Phase Equil. 76, 97, (1992).
- [259] Pierleoni C., Ceperley D. et al. Phys.Rev.Lett. 73, 2145, (1974).
- [260] Project INTAS-93-66, Catalogue of Projects 1993-1995, INTAS, Brussels, 1996. p.1526.
- [261] Ross M., J.Chem.Phys. 75, 1567, (1979).
- [262] Ross M., Phys. Rev. B 58, 669, (1998)
- [263] Ree F., Ross M., Young D. J.Chem.Phys. 79, 1487, (1983).

- [264] Reinholz H., Redmer R., Nagel S., Phys. Rev. Lett. E 52, 5368, (1995).
- [265] Rogers F.J., Phys.Rev. A 24, 1531, (1981).
- [266] Rogers F.J., Equation of state and opacity of dense plasmas, in "Strongly Coupled Plasma Physics", /ed. by S.Ichimaru/, Tokyo, 1990.
- [267] Rogers F.J. in "Strongly Coupled Coulomb Systems", G.Kalman, M.Rommel, K.Blagoev Eds. (Plenum Press, NY-London, 1999) p.15.
- [268] Ronchi C., Hiernaut J-P. et al., Nuclear Science & Engineering. 113, 1, (1993).
- [269] Rosenfeld Y., Ashcroft N. Phys.Rev. A 20, 1208 (1979).
- [270] Rosenfeld Y. Phys.Rev. A 42, 5978 (1990).
- [271] Rosenfeld Y., in "Physics of Strongly Coupled Plasmas", /ed.W.D.Kraeft & M.Schlangles/, World Scientific, 1996, p.27-36.
- [272] Rosenfeld Y, Kahl G.J. Phys.Condens.Matter. 9, L89, (1997).
- [273] Roznyai B.F. Phys.Rev.A, 5(3), 1137, (1972).
- [274] Saumon D., Chabrier G., Van Horn H.M., Astrophys. J. Supp 99, 713, (1995).
- [275] Shaner J. UCRL-52352, LLNL, (1977), IV Int. High Press.Conference (1977)
- [276] Knudson M., Hanson D. et al. Phys. Rev. Lett. 87(22) 225501 (2001)
- [277] Da Silva L., et.al., Phys. Rev. Lett. 78, 483, (1997).
- [278] Stillinger F., Lowett R., J.Chem.Phys., 49(5), 1991, (1968).
- [279] Stillinger F.H., Kirkwood J.G., and Woitowicz P.J., J. Chem. Phys. 32, 1837, (1960).
- [280] Stell G., Penrose P. Phys. Rev. A 4, 1567, (1971).
- [281] Stringfellow G.S., DeWitt H.E. and Slattery W.L., Phys. Rev A41, 1105, (1990).
- [282] "Strongly Coupled Coulomb Systems", G.Kalman, M.Rommel, K.Blagoev Eds. (Plenum Press, NY-London, 1999)
- [283] "Strongly Coupled Coulomb Systems", C.Deutsch and M.Gomber Eds. Journal de Physique IV France, 10 (2000) Pr5.
- [284] Theimer O., Deering W., Phys.Rev.A A287, 134, (1964).
- [285] Theimer O., Kepple R., Phys.Rev., 165(1), 168, (1968), Phys.Rev. A, 1(3), 957, (1970).
- [286] Gryaznov V.K., Iosilevski I.L. et al. Journal de Physique IV, 10 Pr5, 363 (2000).
- [287] Van Horn H. Phase transitions in dense astrophysical plasmas (in "Strongly Coupled Plasma Physics", S.Ichimaru ed. Elsevier, 1990) p.3.
- [288] Wright T.P.,Theimer O., Phys.Fluids, 13(4), 895, (1970).

- [289] Young D. Alder B., Phys.Rev. A 3, 364 (1971).
- [290] Young D.A., Woford J.K. Rogers F.J., Holian K.S., Phys.Lett., 108A, N3, 157, (1985).
- [291] Young D. et al. UCRL-52352, LLNL, Univ.California (1977), Rep.Progr.Phys. 49, 341, (1986).
- [292] Zinc J.V., Phys.Rev. 176, 279, (1968).

Часть III

Основы теории термодинамики
плазмы

Глава 7

Термодинамика классических систем

7.1 Классическое статистическое описание газа и плазмы

Газ и плазма являются средой, которая представляет собой совокупность большого числа N частиц, занимающих достаточно большой объем V . Типичными значениями отношения N/V при нормальных условиях являются величины порядка 10^{19} частиц в см^3 . Предполагается, что между частицами действуют парные силы, определяемые центрально-симметричным потенциалом $\Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, так что полная энергия системы имеет вид суммы

$$\Phi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|), \quad (7.1)$$

где $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ - координаты частиц. В некоторых случаях при описании явлений в плотных газах и плазме возможен более сложный характер взаимодействия частиц, однако, далее будет использоваться выражение (7.1). В общих чертах отличие газа от жидкости можно определить с помощью отношения Φ_{ij}/kT , где kT - средняя кинетическая энергия частиц. Для газов, жидкостей и твердых тел соответственно имеем $\Phi_{ij}/kT \ll 1$, $\Phi_{ij}/kT \sim 1$, $\Phi_{ij}/kT \gg 1$. Как видно, в первом случае отсутствует взаимодействие между частицами; в третьем случае отсутствует влияние средней кинетической энергии. Именно эти обстоятельства позволили создать современные теории идеального газа и идеального кристалла, которые базируются соответственно на предположениях о бесконечном разрежении частиц при их полной неупорядоченности и совершенной упорядоченности частиц при их большой плотности. В дальнейшем нашей задачей будет изучение поведения и свойств систем многих частиц, которые называют макроскопическими телами. Вообще говоря, составляя уравнения движения для каждой частицы системы и интегрируя их, в принципе можно получить все сведения о движении системы частиц. Однако, практически это невозможно из-за очень большого числа уравнений. Кроме того, невозможно определить начальные состояния частиц, поскольку любое макроскопическое измерение дает информацию лишь о средних величинах на большой совокупности частиц. Поэтому для описания закономерностей в макроскопических телах используются статистические методы, которые, однако, должны учитывать определенным образом динамические законы движения частиц. Общий характер физических свойств макроскопических тел в значительной степени не зависит от того, какой механикой описывается движение отдельной частицы как целого. Поэтому мы будем в основном пользоваться

классической механикой, хотя в квантовой механике могут появиться некоторые особенности, а в отдельных случаях возможны даже определенные упрощения.

В классической механике состояние системы N частиц в данный момент времени t определяется заданием значений координат $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ и импульсов $(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N)$ всех частиц системы. Для краткости будем использовать обозначение $x_i = \{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\}$ ($i = 1, 2, \dots, N$). Такое пространство $6N$ переменных называют $6N$ -мерным фазовым или Γ -пространством. Указанные координаты могут быть декартовыми, полярными или другими координатами. Бесконечно малый объем фазового пространства имеет вид

$$d\Gamma = d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_N d^3p_1 d^3p_2 \dots d^3p_N \equiv dx_1 dx_2 \dots dx_N,$$

причем $dx_i = d^3r_i d^3p_i$, $d^3r_i = dx dy dz$, $d^3p_i = dp_{ix} dp_{iy} dp_{iz}$. Всякое измерение физической величины $f(x_1, x_2, \dots, x_N; t)$ невозможно провести мгновенно: оно занимает определенное время. В опыте наблюдается среднее по времени этой величины, зависящей от фазовой точки в Γ -пространстве в момент t :

$$\bar{f}(t) = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} f(x_1, x_2, \dots, x_N; t') dt'. \quad (7.2)$$

Вид выражения (7.2) соответствует предположению о том, что наблюдение ведется в течение интервала времени τ между моментами времени t и $t+\tau$. Естественно, что время τ должно быть таким, чтобы измерения были воспроизводимы в последующие интервалы времени, если только при этом не изменились внешние условия. Если в свойствах системы произошли самопроизвольные флуктуации или изменились внешние условия, то потребуется определенное время, называемое временем релаксации, для "рассасывания" этих изменений в системе. При этом, если время τ больше времени релаксации,

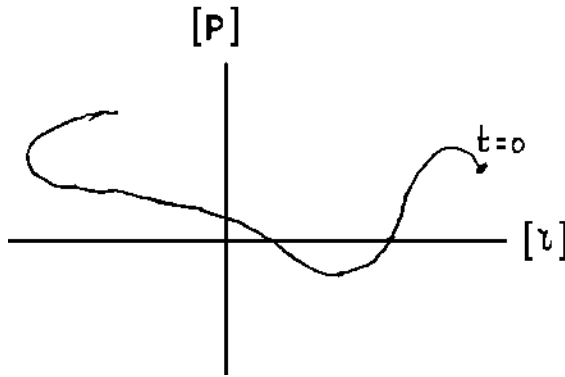


Рис. 7.1: Траектория системы в фазовом пространстве

то средние будут разными до и после возникновения указанных изменений и окажутся независимыми друг от друга. На практике средние по времени не поддаются вычислению из-за отмеченных выше трудностей, связанных с решением уравнений движения и заданием начальных условий. Основная заслуга в решении проблемы вычисления средних значений физических величин принадлежит Дж.Гиббсу. Вместо отыскания средних по времени он предложил иную процедуру. Представим себе совокупность тождественных систем, хаотически распределенным по возможным состояниям, и будем производить усреднение по такой со-

вокупности систем, хаотически распределенным по возможным состояниям, и будем производить усреднение по такой со-

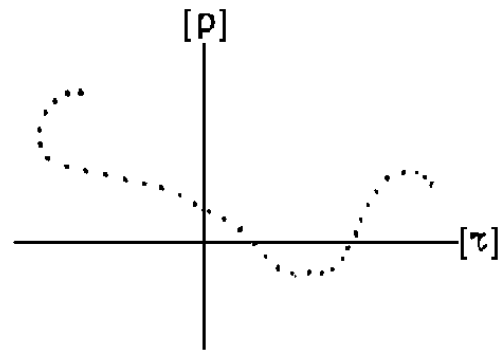


Рис. 7.2: Часть фазового пространства ансамбля с участком траектории, представленной на рис.7.1

вокупности в некоторый момент времени. Такую совокупность называют ансамблем систем, который следует рассматривать как некоторое мысленное образование, представляющее в фиксированный момент времени свойства реальной системы в процессе ее эволюции. Образно выражаясь, можно сказать, что статистический ансамбль как бы дает "моментальную фотографию" эволюции макросистемы. На рис. 7.1 [13] представлена динамическая траектория реальной системы в Γ -пространстве за промежуток времени t , $[\mathbf{p}]$ и $[\mathbf{r}]$ схематически обозначают $3N$ осей импульсов и $3N$ координатных осей. На рис. 7.2 [13] изображена небольшая часть статистического ансамбля. Эта часть ансамбля с помощью систем, взятых в один и тот же момент времени, представляет траекторию реальной системы за промежуток времени, указанный на рис. 7.1. На рис. 7.2 каждая точка представляет собой систему ансамбля. Полный ансамбль намного больше и сложнее, чем показанная на рис. 7.2 его небольшая часть. В классической статистической механике систем многих частиц вероятность распределения систем в ансамбле описывается функцией распределения $D_N(x_1, x_2 \dots x_N; t)$, так что величина $D_N(x_1, x_2 \dots x_N; t)dx_1, dx_2 \dots dx_N$ является вероятностью того, что в момент времени t система находится в состоянии, для которого координаты и импульсы первой частицы находятся в бесконечно малом объеме dx_1 , около точки x_1 и т.д. вплоть до N -ой частицы, координаты и импульс которой находятся в бесконечно малом объеме dx_N около точки x_N . Если функцию распределения нормировать

$$\int D_N(x_1, x_2 \dots x_N; t)dx_1, dx_2 \dots dx_N = 1, \tag{7.3}$$

где интегрирование ведется по всему Γ -пространству, то среднее значение физической величины определяется выражением

$$\langle f(t) \rangle = \int f(x_1, x_2 \dots x_N; t)D_N(x_1, x_2 \dots x_N; t)dx_1, dx_2 \dots dx_N. \tag{7.4}$$

Усреднение с помощью функции распределения освобождает от необходимости следить за изменением истинного значения физической величины $f(x_1, x_2 \dots x_N; t)$ со временем с целью определения ее среднего значения (7.2). Однако возникает вопрос об эквивалентности двух видов усреднения, эта проблема является предметом обсуждения эргодической теории. Название "эргодическая" ввел Гиббс от греческих слов $\epsilon\rho\gamma\omicron\nu$ - работа и $\omicron\delta\omicron\sigma$ - путь. В эргодической теории утверждается, что при $\tau \rightarrow \infty$ временное среднее (7.2) равно фазовому среднему (7.4). Не вдаваясь в подробности этой теории, укажем лишь важные свойства, которыми обладает эргодическая система. При временном усреднении координаты $x_1, x_2 \dots x_N$, от которых зависит подинтегральная функция в (7.2), являются функциями времени и удовлетворяют динамическим уравнениям движения Гамильтона

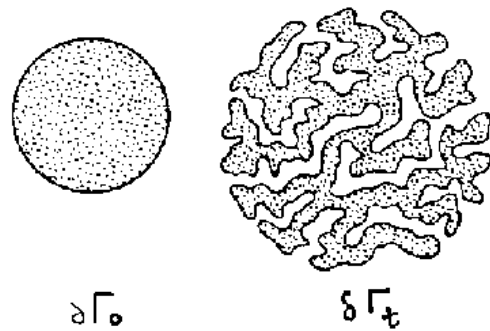


Рис. 7.3: Расплывание элемента фазового пространства

При временном усреднении координаты $x_1, x_2 \dots x_N$, от которых зависит подинтегральная функция в (7.2), являются функциями времени и удовлетворяют динамическим уравнениям движения Гамильтона

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{r}_i} \quad (i = 1, 2, \dots N), \tag{7.5}$$

где $H_N(x_1, x_2 \dots x_N)$ - функция Гамильтона, которую будем считать явно не зависящей от времени. С другой стороны, при осреднении по ансамблю (7.4) координаты $x_1, x_2 \dots x_N$ являются независимыми переменными и t рассматривается как параметр.

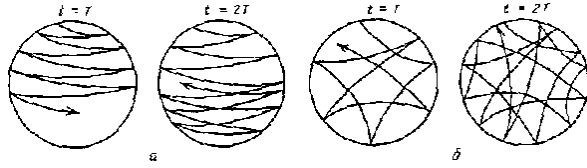


Рис. 7.4: Различие между регулярным эргодическим (а) и перемешивающим(б) движениями

Очевидно, что эквивалентность обоих видов усреднения возможна при условии, что решение уравнений (7.5) фактически не будет зависеть от начальных условий, т.е. в процессе столкновений система должна "забыть" свое начальное положение. Имеется другое важное свойство эргодической системы. Если взять в начальный момент времени $t = 0$ некоторую ячейку фазового пространства $\delta\Gamma_0$ правильной формы, то с течением времени она может расплыться по всему фазовому пространству и принять причудливую форму типа амёбы (рис. 7.3 [10]). При этом, как будет показано ниже, $\delta\Gamma_0 = \delta\Gamma_t$, т.е. объем ячейки фазового пространства сохраняется. Растекание означает, что точки близко расположенные в начальный момент с течением времени могут удаляться друг от друга настолько, что их движение будет независимым. Способность фазовой ячейки растекаться в фазовом пространстве и связанное с этим возникновение независимого движения точек принято называть перемешиванием. Перемешивание характерно для неустойчивых систем, в которых близкие вначале траектории с течением времени быстро удаляются друг от друга. При этом, если фазовое пространство системы является конечным, то фазовые траектории сильно в нем запутываются. Связь неустойчивости движения с явлением перемешивания впервые рассматривалась Н.С.Крыловым [17]. Перемешивание является достаточным, но не необходимым условием эргодичности системы. Эргодичностью обладает более широкий класс движений. Для этого необходимо лишь, чтобы траектории достаточно полно заполняли поверхность постоянной энергии. Этим свойством обладают почти все системы, совершающие финитное движение. Это можно понять из рис. 7.4. В эргодическом случае без перемешивания (периодическое движение) траектория последовательно заполняет фазовое пространство (рис. 7.4) [10]. При перемешивании фазовое пространство тоже заполняется, но иным (непериодическим) способом (рис. 7.4). Сначала за некоторое время T система достаточно равномерно покрывает сеткой траекторий все фазовое пространство. Через время $2T$ это явление примерно повторится, таким образом, что размеры ячеек сетки окажутся приблизительно в два раза меньше. Таким образом, мы должны воспринять тот факт, что при решении системы уравнений (7.5), описывающую динамику систем многих частиц, их движение может происходить по случайным траекториям, причем траектории достаточно полно заполняют фазовое пространство. Это явление называется динамической стохастичностью. Его синонимы - хаос, стохастичность, нерегулярное движение. Явление хаоса присуще только нелинейным системам. Ниже мы вернемся к рассмотрению этого явления.

7.2 Уравнение Лиувилля

В 7.1 было отмечено, что объем ячейки фазового пространства сохраняется. Это свойство доказывается теоремой Лиувилля, согласно которой для систем, подчиняющихся динамическим уравнениям Гамильтона (7.5), фазовый объем остается постоянным при движении системы. То есть, если в начальный момент времени фазовые точки $x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0$ непрерывно заполняли некоторую область начальных значений Γ_0 в фазовом пространстве, а в момент времени t они заполняют область Γ_t , соответствующие фазовые объемы равны между собой:

$$\int_{\Gamma_0} dx_1^0, dx_2^0, \dots, dx_N^0 = \int_{\Gamma_t} dx_1, dx_2, \dots, dx_N. \quad (7.6)$$

Доказательство можно произвести с помощью замены переменных интегрирования x_1, x_2, \dots, x_N на $x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0$ в правой части этого равенства [22]

$$\int_{\Gamma_t} dx_1, dx_2, \dots, dx_N = \int_{\Gamma_0} \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} dx_1^0, dx_2^0, \dots, dx_N^0,$$

где $\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)/\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)$ - якобиан преобразования, имеющий вид функционального определителя с элементами $\partial x_i/\partial x_k^0$. Чтобы доказать теорему, нужно показать, что этот якобиан равен единице. Воспользуемся свойством определителей

$$\frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} = \frac{\partial(x'_1, x'_2, \dots, x'_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x'_1, x'_2, \dots, x'_N)},$$

где x'_1, x'_2, \dots, x'_N - значения координат и импульсов в произвольный момент времени t' . Продифференцируем это тождество по t , считая t' постоянным

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} = \frac{\partial(x'_1, x'_2, \dots, x'_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} \frac{d}{dt} \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x'_1, x'_2, \dots, x'_N)},$$

Отсюда, полагая $t' = t$ будем иметь

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} = \frac{\partial(x_1, x_2, \dots, x_N)}{\partial(x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \dot{\mathbf{p}}_i}{\partial \mathbf{p}_i} + \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \mathbf{r}_i} \right),$$

т.е. отличный от нуля результат в правой части дают лишь члены якобиана, расположенные на главной диагонали. Но в силу уравнений (7.5) сумма в правой части этого выражения равна нулю, так как

$$\frac{\partial \dot{\mathbf{p}}_i}{\partial \mathbf{p}_i} + \frac{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{r}_i} = 0. \quad (7.7)$$

Таким образом, производная по времени от якобиана преобразования равна нулю, а якобиан с учетом условия $(x_1, x_2, \dots, x_N) \rightarrow (x_1^0, x_2^0, \dots, x_N^0)$ при $t \rightarrow 0$ равен единице. Из теоремы (7.6), как следствие, получается уравнение Лиувилля для функции распределения $D_N(x_1, x_2, \dots, x_N)$. Если сохраняется фазовый объем, то должна сохраняться и плотность вероятности распределения систем (фазовых точек) в этом объеме. Условие сохранения можно записать в виде уравнения неразрывности в фазовом пространстве

$$\frac{\partial D_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} (D_N \dot{\mathbf{r}}_i) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} (D_N \dot{\mathbf{p}}_i) \right] = 0,$$

т.е. ансамбль систем можно рассматривать как жидкость с плотностью D_N и вектором скорости течения $\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_N$. Продолжая аналогию с жидкостью, учтем, что сумма по $i = 1, 2, \dots, N$ в левой части равенства (7.7) является оператором дивергенции в $6N$ -мерном фазовом пространстве. В связи с тем, что оператор равен нулю, движение фазовой "жидкости" несжимаемо, также, как движение обычной несжимаемой жидкости в трехмерном пространстве, скорость которой \mathbf{V} подчиняется уравнению с $div \mathbf{V} = 0$. Если продифференцировать произведение функций в уравнении неразрывности и учесть условия сохранения фазового объема (7.6), а также исключить величины $\{\dot{\mathbf{r}}_i, \dot{\mathbf{p}}_i\}$ согласно уравнениям (7.5), то получим уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial D_N}{\partial t} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{r}_i} \frac{\partial D_N}{\partial \mathbf{p}_i} - \frac{\partial H_D}{\partial \mathbf{p}_i} \frac{\partial D_N}{\partial \mathbf{r}_i} \right) \equiv \{H_N, D_N\}, \quad (7.8)$$

где сумма в правой части записывается в виде скобок Пуассона $\{H_N, D_N\}$. Это уравнение является основным для построения равновесных и неравновесных классических ансамблей, оно дает принципиальную возможность вычислять D_N в любой момент времени t , если она известна в моменты времени t_0 (начальный момент времени $t = t_0$ не отличается от начального момента времени $t = 0$). Можно ожидать в соответствии с эргодической теорией, что любые начальные распределения будут с течением времени приближаться к равновесному распределению за время релаксации, т.е. за тот промежуток времени, в течение которого должен обязательно произойти переход к статистическому равновесию. Поэтому общей задачей в физике жидкостей и газов является отыскание приближенных законов перехода к равновесию и, естественно, определение макроскопических равновесных параметров. Употребление в этой формулировке слова "приближенных" подчеркивает, что не следует стремиться к получению точного решения для D_N . Последнее связано с решением уравнения (7.8), что является непреодолимой математической задачей и не очень нужной, поскольку необходимо вычислить лишь некоторые средние макроскопические величины.

7.3 Цепочка уравнений для s -частичных функций распределения

Будем исходить из представления, что в большинстве случаев интересующие нас макроскопические величины зависят не от всей функции распределения D_N в Γ -пространстве, а от вероятностей того, что в некотором элементе объема dx_1 фазового пространства находится одна частица, в элементе объема dx_1, dx_2 две частицы, в элементе объема dx_1, dx_2, \dots, dx_s - s частиц независимо от положения других частиц, причем $s \ll N$. Такое сокращенное описание системы будет определяться частичными функциями распределения, которые получаются интегрированием D_N по всем переменным, кроме x_1, x_2, \dots, x_s .

$$V^{-s} F_s(x_1, x_2, \dots, x_s; t) = \int D_N(x_1, x_2, \dots, x_N; t) dx_{s+1} \dots dx_N, \quad (7.9)$$

где $F_s(x_1, x_2, \dots, x_s; t)$ - функция распределения, определенная таким образом, что

$$V^{-s} F_s(x_1, x_2, \dots, x_s; t) dx_1, dx_2, \dots, dx_s$$

дает вероятность того, что в момент времени t динамические состояния данной группы частиц находятся соответственно в бесконечно малых фазовых объемах dx_1, dx_2, \dots, dx_s . Интегрирование ведется по объему Γ_{N-s} пространства. Чтобы получить систему уравнений для частичных функций распределения нужно конкретизировать вид гамильтониана системы. Мы будем пользоваться общепринятой формой гамильтониана в виде суммы трех слагаемых: K - кинетической энергии системы N частиц массы m_i , потенциальной энергии частиц во внешнем поле $U_i(\mathbf{r}_i)$ и потенциальной энергии взаимодействия частиц в виде (7.1)

$$H_N = \sum_{i=1}^N \left(\frac{p_i^2}{2m_i} + U_i(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (7.10)$$

Гамильтониан (7.10) и другие приведенные выше величины записаны в форме, соответствующей системе одинаковых частиц. Отметим, что для одинаковых частиц функция распределения D_N должна быть симметричной функцией координат x_1, x_2, \dots, x_N . Требование симметричности не противоречит уравнению Лиувилля (7.8), поскольку гамильтониан (7.10) также симметричен. При выводе общих уравнений проще рассматривать систему одинаковых частиц, а, затем, достаточно просто можно провести обобщение результатов на систему частиц разных сортов. Интегрируя уравнение Лиувилля по x_{s+1}, \dots, x_N и учитывая при этом вид гамильтониана (7.10) и определение s -частичной функции распределения (7.9), находим [10]

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \left(\frac{\mathbf{p}_i}{m_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} + \frac{\partial U_i}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right) - \sum_{1 \leq i < j \leq s} \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} \right] F_s = \\ & = \frac{N}{V} \left(1 - \frac{s}{N} \right) \sum_{i=1}^s \int \frac{\partial \Phi_{i,s+1}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial F_{s+1}}{\partial \mathbf{p}_i} d^3 r_{s+1} d^3 p_{s+1}. \end{aligned} \quad (7.11)$$

Как видно, мы имеем дело с цепочкой уравнений, где уравнение для F_s содержит еще и функцию распределения F_{s+1} . Физически это означает незамкнутость любой группы из s частиц, взаимодействующих с остальными $N - s$ частицами. Последнее уравнение системы при $s = N$ является замкнутым и тождественным уравнению Лиувилля (7.8). Уравнения (7.11) были выведены Боголюбовым и чуть позже и независимо Борном, Грином, Кирквудом, Ивоном, поэтому в литературе их называют уравнениями ББГКИ. Как уже отмечалось, нас будут интересовать группы с ограниченным числом частиц, когда можно пренебречь отношением s/N . Отсюда возникает задача нахождения асимптотических выражений для F_s при $N \rightarrow \infty$ и $V \rightarrow \infty$, так что плотность числа частиц $n = N/V$ остается постоянной величиной. Определенные таким образом асимптотические функции распределения F_s будут описывать реальные системы с весьма большим конечным числом частиц, находящихся в большом, но конечном макроскопическом объеме. Для макроскопического описания состояния системы многих частиц, вообще говоря, достаточно знать две первые функции распределения $F_1(x_1, t)$ и $F_2(x_1, x_2, t)$. Например, в равновесном случае, используя те же приемы вычислений, что и при выводе цепочки уравнений ББГКИ (7.11), для средней энергии системы будем иметь

$$\langle H_N \rangle = \int H_N D_N dx_1 dx_2 \dots dx_N =$$

$$= \frac{N}{V} \int \frac{p^2}{2m} F_1(x_1) dx_1 + \frac{1}{2} \left(\frac{N}{V} \right)^2 \int \Phi_{12}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) F_2(x_1, x_2) dx_1 dx_2. \quad (7.12)$$

Аналогичная ситуация имеет место и для других равновесных и неравновесных макроскопических параметров. Таким образом, если удастся вычислить функции F_1 и F_2 , то можно определить все макроскопические свойства системы многих частиц. Решение проблемы упрощается, если в уравнениях присутствует малый параметр. Как уже отмечалось, такой параметр существует, если система представляет собой достаточно разреженный газ, в котором средняя кинетическая энергия гораздо больше потенциальной энергии. Для выделения малого параметра запишем систему уравнений ББГКИ в безразмерной форме. Для этого введем безразмерные переменные: $t' = t/\tau$, где τ - характерный масштаб времени - время пробега частицы на характерном среднем расстоянии между частицами $n^{-1/3}$ (n - плотность числа частиц в 1 см^3). Для определения τ нам потребуется скорость свободного движения частиц до столкновения, которую можно отождествить со средней тепловой скоростью частиц $v_T = (3kT/m)^{1/2}$. Тогда $\tau = n^{-1/3}/v_T$. С учетом этих рассуждений, введем безразмерную координату $\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i/n^{-1/3}$ и безразмерный импульс $\mathbf{p}'_i = \mathbf{p}_i/mv_T$ ($i = 1, 2, \dots, s$). Учитывая, что потенциал $\Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ отличен от нуля только при $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < r_0$, где r_0 - эффективный радиус взаимодействия между частицами, вместо элемента объема d^3r_{s+1} в правой части системы уравнений (7.11) удобно ввести безразмерную величину $d\mathbf{r}'_{s+1} = d\mathbf{r}_{s+1}/r_0^3$. Для потенциальной энергии Φ_{ij} введем характерную величину Φ_0 , так что $\Phi'_{ij} = \Phi_{ij}/\Phi_0$. Для потенциала внешних сил характерную величину обозначим через U_0 . Кроме того, заметим, что $F_{s+1}d^3\mathbf{p}_{s+1}$ имеет ту же размерность, что и F_s , равную $[p]^{-3s}$. Последнее следует из определения (7.9). С учетом всех указанных обстоятельств безразмерная форма уравнений (7.11) будет иметь вид [7]

$$\left[\frac{\partial}{\partial t'} + \sum_{i=1}^s \left(\mathbf{p}'_i \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}'_i} - \frac{U_0}{3kT} \frac{\partial U'_i}{\partial \mathbf{r}'_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'_i} \right) - \frac{\Phi_0}{3kT} \sum_{1 \leq i < j \leq s} \frac{\partial \Phi'_{ij}}{\partial \mathbf{r}'_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}'_i} \right] F'_s = \\ = \frac{\Phi_0}{3kT} nr_0^3 \sum_{i=1}^s \int \frac{\partial \Phi'_{i,s+1}}{\partial \mathbf{r}'_i} \cdot \frac{\partial F'_{s+1}}{\partial \mathbf{p}'_i} d^3r'_{s+1} d^3p'_{s+1}. \quad (7.13)$$

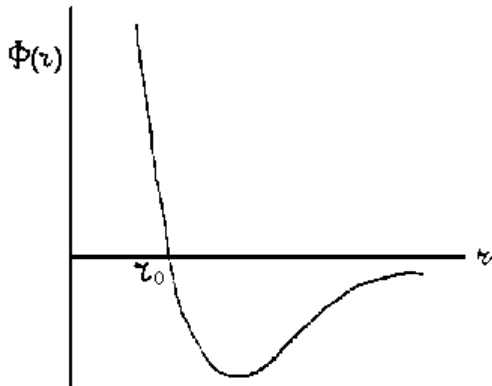


Рис. 7.5: Потенциал Ленарда-Джонса

Как видно, это уравнение содержит, три безразмерных параметра $U_0/3kT$, $\Phi_0/3kT$ и nr_0^3 . Параметр $U_0/3kT$ характеризует вклад внешней силы, которая действует на каждую частицу в отдельности и поэтому существенных трудностей при решении уравнений (7.13) этот вклад не дает. Принципиальное значение для возможности решения системы уравнений (7.13) имеют два других параметра $\Phi_0/3kT$ и nr_0^3 , если хотя бы один из них мал. В случае разреженного газа среднее расстояние между частицами $n^{-1/3}$ гораздо больше радиуса действия сил r_0 , следо-

вательно, в этом случае малым параметром является nr_0^3 . При этом взаимодействие может быть сильным, но короткодействующим, т.е. $\Phi_0/kT \sim 1$. Термин "короткодействующий" относится к потенциалам, которые при $r \rightarrow \infty$ достаточно быстро

стремятся к нулю (по крайней мере, как r^{-n} , где $n \geq 3$). Типичным примером является потенциал Ленарда-Джонса (рис. 7.5):

$$\Phi(r) = 4\Phi_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]. \quad (7.14)$$

Он содержит два параметра r_0 и Φ_0 . При $r = r_0$ функция $\Phi(r)$ обращается в нуль. Параметр Φ_0 определяет глубину минимума функции $\Phi(r)$. Параметр r_0 в данном случае можно принять за эффективный радиус взаимодействия между частицами. Потенциалы такого типа характерны для сил взаимодействия между нейтральными частицами- атомами и молекулами. Слабое взаимодействие реализуется, если малым параметром является Φ_0/kT .

Особый интерес представляет случай, когда $\Phi_0/kT \ll 1$, но в сфере взаимодействия находится много частиц, так что $nr_0^3 \gg 1$. Такая ситуация характерна для систем, где силы взаимодействия между частицами являются дальнедействующими, например, для плазмы, где заряженные частицы взаимодействуют по закону Кулона. Здесь требуется обсудить физический смысл величины r_0 . Сам по себе кулоновский потенциал не содержит параметра, который можно принять за радиус взаимодействия между заряженными частицами. Однако в плазме каждая заряженная частица окружена "атмосферой" с избытком частиц противоположного знака, экранирующих электрическое поле частицы. Расстояние, на котором происходит экранирование - порядка пространственного масштаба разделения зарядов и равно, как будет показано ниже, $r_D = (kT/4\pi e^2 n)^{1/2}$. Это расстояние представляет собой эффективный радиус действия сил и называется дебаевским радиусом. На расстоянии $\sim r_D$ параметр в правой части уравнения (7.13) с учетом соотношения для r_D будет равен

$$nr_0^3 \cdot \Phi_0/kT = nr_0^3 \frac{e^2}{n^{-1/3} kT}, \quad (7.15)$$

где принято $\Phi_0 \sim e^2/n^{-1/3}$. Это условие выполняется для газовой плазмы во многих практически важных случаях. Случай, когда $\Phi_0/kT \ll 1$ и $nr_0^3 \sim 1$, соответствует слабому взаимодействию между частицами. Такая ситуация возникает обычно для квантовых систем.

7.4 Термодинамика плотных нейтральных газов

В равновесии функция распределения D_N не зависит от времени, поэтому в уравнении Лиувилля (7.8) скобки Пуассона будут равны нулю. Это означает, что D_N является функцией гамильтониана H . Явный вид этой функции был установлен Гиббсом и называется распределением Гиббса или каноническом распределением

$$D_N = \frac{1}{Z_N} \exp\{-\beta H\}, \quad (7.16)$$

где для удобства введено обозначение $\beta = 1/kT$. Выражение для множителя Z_N , называемого статистической суммой канонического ансамбля, получается из условия нормировки (7.16)

$$Z_N = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N} N!} \int_V \exp\{-\beta H\} d^3r_1 \dots d^3r_N d^3p_1 d^3p_N. \quad (7.17)$$

Здесь интеграл поделен на размер элементарной фазовой ячейки $(2\pi\hbar)^{3N}$ и величину $N!$, исключаящую тождественные перестановки частиц. Если взять гамильтониан в виде (7.10) и выполнить простое интегрирование по импульсам, то будем иметь

$$Z_N = \frac{1}{\lambda^{3N} N!} \int_V \exp \left\{ -\beta \sum_{1 \leq i \leq N} U_i(\mathbf{r}_i) - \beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right\} d^3 r_1 \dots d^3 r_N, \quad (7.18)$$

где $\lambda = (2\pi\hbar^2\beta/m)^{1/2}$ - длина волны де Бройля. Основной задачей в равновесной статистической механике является вычисление статистической суммы Z_N , от которой зависят термодинамические величины. В классической механике это связано с вычислением интеграла (7.18) по конфигурационному пространству $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$. Чтобы упростить задачу, потенциал внешнего поля U_i обычно не рассматривается, поскольку внутренние статистические свойства системы зависят от потенциала взаимодействия между частицами Φ_{ij} . Таким образом, проблема изучения равновесных свойств классических жидкостей и газов заключается в возможности вычисления конфигурационного интеграла

$$Q_N = \int_V \exp \left\{ -\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \right\} d^3 r_1 \dots d^3 r_N = \lambda^{3N} N! Z_N \quad (7.19)$$

при заданном потенциале взаимодействия. Заметим, что в отсутствие взаимодействия, когда $\Phi_{ij} = 0$, конфигурационный интеграл равен V^N и $Z_N = V^N / \lambda^{3N} N!$ представляет собой статистическую сумму идеального газа. Если воспользоваться известной термодинамической формулой

$$p = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z_N}{\partial V} \right)_{\beta, N}, \quad (7.20)$$

то получим уравнение состояния идеального газа $\beta p = N/V$. Интеграл (7.19) не удается вычислить точно даже для случая потенциала твердых сфер

$$\Phi(r) = \infty, \quad r \leq \sigma; \quad \Phi(r) = 0, \quad r > \sigma, \quad (7.21)$$

где σ - диаметр сферы. Эффективный приближенный метод вычисления конфигурационного интеграла разработан Дж.Майером [21]. Теория Майера основана на групповых разложениях, комбинаторных методах и диаграммной технике. Майер ввел функцию

$$f_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) = \exp \{ -\beta \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \} - 1. \quad (7.22)$$

В соответствии со свойствами потенциальной энергии взаимодействия двух частиц, функции f_{ij} весьма малы при $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| > r_0$, стремятся к -1 при $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| < r_0$ и являются ограниченными во всей области расстояний. Подинтегральное выражение в конфигурационном интеграле можно разложить по группам из одной, двух, трех и т.д. частиц

$$Q_N = \int_V d^3 r_1 \dots d^3 r_N \prod_{1 \leq i < j \leq N} (1 + f_{ij}) = \int_V d^3 r_1 \dots d^3 r_N \cdot [1 + (f_{12} + f_{13} + \dots + f_{N-1, N}) + (f_{12}f_{23} + f_{12}f_{13} + f_{13}f_{23} + f_{12}f_{23}f_{13} + \dots)]. \quad (7.23)$$

Как видно, здесь имеется возможность учитывать не только парные, но и взаимодействия трех и более частиц. Общая структура выражения (7.23) и разбиение частиц по группам приобретает наглядный вид, если каждой группе частиц сопоставить диаграмму. Каждой из координат $\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N$ приведем в соответствие пронумерованную жирную точку, а каждому множителю f_{ij} - линию, соединяющую i -ю и j -ю точки. Тогда интеграл (7.23) можно представить в диаграммной записи

$$Q_N = \int_V d^3 r_1 \dots d^3 r_N \left[\overset{1}{\bullet} + \left(\overset{1}{\bullet} \text{---} \overset{2}{\bullet} + \dots + \overset{N-1}{\bullet} \text{---} \overset{N}{\bullet} \right) + \left(\begin{array}{c} \overset{2}{\bullet} \\ / \quad \backslash \\ \overset{1}{\bullet} \quad \overset{3}{\bullet} \end{array} + \begin{array}{c} \overset{4}{\bullet} \\ / \quad \backslash \\ \overset{2}{\bullet} \quad \overset{3}{\bullet} \end{array} + \begin{array}{c} \overset{3}{\bullet} \\ / \quad \backslash \\ \overset{1}{\bullet} \quad \overset{2}{\bullet} \end{array} + \begin{array}{c} \overset{2}{\bullet} \\ / \quad \backslash \\ \overset{1}{\bullet} \quad \overset{3}{\bullet} \end{array} + \dots \right) + \dots \Big]. \quad (7.24)$$

Диаграммы могут быть разделены на связные, т.е. такие, в которых все точки связаны друг с другом линиями, и несвязные, в которых имеются изолированные друг от друга группы точек или отдельные точки. Под знаком интеграла (7.24) изображены только связные диаграммы. Однако здесь имеются и несвязные диаграммы, например,

$$f_{12} f_{34} f_{45} = \begin{array}{c} \bullet \text{---} \bullet \\ \bullet \text{---} \bullet \\ \bullet \text{---} \bullet \end{array} \quad (7.25)$$

где частицы 1,2 и 3,4,5 не связаны друг с другом. Связные диаграммы для одной и той же группы частиц могут отличаться друг от друга по топологии их построения. В первой круглой скобке под знаком интеграла (7.24) присутствуют топологически одинаковые диаграммы, они отличаются только нумерацией точек и дают одинаковые вклады в интеграл. Во второй скобке три первые диаграммы топологически одинаковы - третья диаграмма имеет другую топологию и дает в интеграл вклад, отличный от трех первых диаграмм. Будем называть k - группой любую k -частично связную диаграмму и введем понятие группового интеграла $b_k(V, T)$, определив его как произведение нормирующего множителя $1/k!V\lambda^{3k-3}$ на сумму интегралов, соответствующих всем различным k -группам. В этом определении различными k -группами считаются как диаграммы, отличающиеся своей топологией, так и диаграммы, отличающиеся нумерацией точек. При $k = 1$ диаграмма (\bullet) является 1 - группой и соответственно этому

$$b_1 = \frac{1}{V} \int_V d^3 r_1 = 1. \quad (7.26)$$

2-группой является диаграмма $1 \bullet \text{---} \text{---} \text{---} \bullet 2$, соответственно,

$$b_2 = \frac{1}{2!V\lambda^3} \int_V d^3 r_1 d^3 r_2 f_{12} = \frac{1}{2!\lambda^3} \int d^3 r_{12} f_{12}(|\mathbf{r}_{12}|). \quad (7.27)$$

Последний интеграл получен при переходе к координатам центра инерции $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ и относительному радиусу-вектору $\bar{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Четыре 3-группы присутствуют под знаком интеграла (7.24) во второй круглой скобке и групповой интеграл b_3 равен

$$b_3 = \frac{1}{3!V\lambda^6} \int_V d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 (f_{12} f_{23} + f_{12} f_{13} + f_{13} f_{23} + f_{12} f_{23} f_{13}). \quad (7.28)$$

При $k = 4$ существует уже 38 связных групп, т.е. по мере рассмотрения групп старших порядков, проблема вычисления соответствующих групповых интегралов существенно усложняется. Групповые интегралы обладают двумя важными свойствами. Первое из них заключается в том, что $b_k(V, T)$ есть величина безразмерная. Второе свойство связано с существованием для $b_k(V, T)$ конечного предела при $V \rightarrow \infty$,

поскольку из k интегрирований лишь одно ведется по конечному объему V . Остальные $k - 1$ интегрирований можно осуществить для бесконечных объемов, так как все множители $f_{ij} \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}_{ij}| \gg r_0$. Поэтому групповые интегралы b_k можно считать независимыми от V . Любая N -частичная диаграмма представляет собой произведение нескольких групп, с числом точек не превышающих N . Например, пятичастичная диаграмма (7.25) является произведением двух связанных групп - двухчастичной и трехчастичной. Если число k -групп есть m_k , то имеет место соотношение

$$\sum_{k=1}^N k \cdot m_k = N. \quad (7.29)$$

Для того же примера (7.25) из (7.29) следует $m_1 = m_4 = m_5 = 0$, $m_2 = m_3 = 1$. Ясно также, если $m_N = 1$, то все остальные $m_k = 0$. Заданный набор целых чисел $\{m_k\}$, удовлетворяющих условию (7.29), определяет некоторую диаграмму не единственным способом, так как существует много способов построить k -группу, а также много способов распределения частиц по группам. Во второй круглой скобке выражения (7.24) первые три диаграммы построены одним способом (три частицы и две линии), третья диаграмма построена другим способом (три частицы - три линии), кроме того, в первых трех диаграммах частицы размещены тремя различными способами. Таким образом, набор целых чисел $\{m_k\}$ определяет некоторую совокупность диаграмм. Исходя из характера разложения (7.23), можно символически записать выражение для k -частичного группового интеграла

$$b_k = \frac{1}{V k! \lambda^{3k-3}} \int_V d^3 r_1 \dots d^3 r_k \sum_{1 \leq i < j \leq k} \prod f_{ij}, \quad (7.30)$$

где сумма берется по всем произведениям, относящимся к одной и той же группе. В каждый член подинтегрального выражения группового интеграла входит произведение не менее $k - 1$ и не более $k(k - 1)/2$ функций f_{ij} . Конфигурационный интеграл можно выразить через групповые интегралы [21]

$$Q_N = N! \lambda^{3N} \sum_{\{m_k\}} \prod_{k=1}^N \frac{1}{m_k!} \left(\frac{V b_k}{\lambda^3} \right)^{m_k}, \quad (7.31)$$

где суммирование производится по всем наборам чисел m_k с учетом условия (7.29). Отсюда для статистической суммы (7.17) будем иметь

$$Z_N = \sum_{\{m_k\}} \prod_{k=1}^N \frac{1}{m_k!} \left(\frac{V b_k}{\lambda^3} \right)^{m_k}, \quad (7.32)$$

Однако из-за условия (7.29) и сложной структуры пользоваться этим выражением затруднительно. Переход к статистической сумме большого канонического ансамбля Z_G позволяет освободиться от условия (7.29) и получить простое выражение

$$Z_G = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{m_k\}} \frac{z^N}{m_k!} \prod_{k=1}^N \left(\frac{V b_k}{\lambda^3} \right)^{m_k} = \exp \left\{ \frac{V}{\lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} z^k b_k \right\}, \quad (7.33)$$

где $z = \exp(\beta\mu)$ - активность, μ - химический потенциал. Через большую статистическую сумму выражаются все термодинамические параметры. Для давления и

плотности частиц, учитывая (7.33), имеем соответственно

$$p = \frac{1}{\beta V} \ln Z_G = \frac{1}{\beta \lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} z^k b_k, \quad (7.34)$$

$$\frac{N}{V} = \frac{z}{V} \left(\frac{\partial \ln Z_G}{\partial z} \right)_{\beta, V} = \frac{1}{\lambda^3} \sum_{k=1}^{\infty} k z^k b_k. \quad (7.35)$$

Выражения (7.34) и (7.35) описывают в параметрической форме уравнение состояния неидеальных газов и простых жидкостей. Если исключить параметр z , то получим уравнение состояния в форме так называемого вириального разложения [21]

$$\beta \frac{PV}{N} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \left(\frac{N \lambda^3}{V} \right)^{k-1}. \quad (7.36)$$

Связь между коэффициентами a_k и b_k устанавливается подстановкой в (7.36) выражений (7.34) и (7.35) и приравниванием коэффициентов при одинаковых степенях z . Например,

$$a_1 = b_1, \quad a_2 = -b_2, \quad a_3 = 4b_2^2 - 2b_3. \quad (7.37)$$

Таким образом, все вириальные коэффициенты a_k могут быть выражены через предельные значения групповых интегралов при $V \rightarrow \infty$. Вычислим приближенно a_2 , пользуясь характерной особенностью потенциалов для короткодействующих взаимодействий. Из (7.27) имеем

$$-a_2 = b_2 = \frac{2\pi}{\lambda^3} \left[\int_0^\sigma (e^{-\beta\Phi_{12}} - 1) r^2 dr + \int_\sigma^\infty (e^{-\beta\Phi_{12}} - 1) r^2 dr \right].$$

Считая частицу абсолютно твердой сферой с радиусом $\sigma/2$, воспользуемся в первом интеграле потенциалом (7.21); во втором интеграле разложим экспоненту $e^{-\beta\Phi_{12}} \simeq 1 - \beta\Phi_{12}$, пользуясь тем, что силы притяжения для характерного потенциала типа (7.14) малы. В этом случае будем иметь

$$b_2 = \frac{1}{\lambda^3} (\beta a - b),$$

где величины $b = 16\pi/3 (\sigma/2)^3$ - учетверенный объем частицы и

$$a = 2\pi \int_\sigma^\infty |\Phi_{12}(|r|)| r^2 dr$$

связаны соответственно с собственным объемом частиц и средним значением потенциальной энергии сил притяжения между частицами. Таким образом, при учете только парных взаимодействий, принимая во внимание (7.36) и (7.37), имеем

$$\frac{\beta p V}{N} = 1 + \frac{N b}{V} - \beta a \frac{N}{V}. \quad (7.38)$$

Отсюда можно получить интерполяционную формулу, описывающую приближенно не только свойства неидеального газа, но и жидкости. Для этого произведем в (7.38) замену

$$1 + \frac{N b}{V} \simeq \left(1 - \frac{N b}{V} \right)^{-1},$$

которая грубо учитывает малую сжимаемость жидкости при $p \rightarrow \infty V \rightarrow Nb$. Нетрудно заметить, что при такой замене получается уравнение Ван-дер-Ваальса.

В настоящее время известны семь первых вириальных коэффициентов. Из них a_2 , a_3 , и a_4 выражаются через элементарные функции. Коэффициенты более высокого порядка получены с использованием аналитического и численного интегрирования, а также методом Монте-Карло. Известные семь вириальных коэффициентов имеют следующие численные значения [32]:

$$a_2 = \frac{b}{\lambda^3}, \quad a_3 = 0,625 \left(\frac{b}{\lambda^3}\right)^2, \quad a_4 = 0,28695 \left(\frac{b}{\lambda^3}\right)^3, \quad a_5 = (0,1103 \pm 0,0003) \left(\frac{b}{\lambda^3}\right)^4, \\ a_6 = (0,0386 \pm 0,0004) \left(\frac{b}{\lambda^3}\right)^5, \quad a_7 = (0,0138 \pm 0,0004) \left(\frac{b}{\lambda^3}\right)^6, \quad (7.39)$$

Существует также оценка $a_8 \simeq 0,004(b/\lambda^3)^7$. Уравнению состояния в виде вириального ряда по плотности (7.36) можно дать относительно простую физическую интерпретацию, рассматривая взаимное расположение частиц как функцию температуры и плотности. По мере уменьшения температуры и возрастания плотности в газах будут образовываться группы из двух, трех и т.д. частиц, до тех пор пока не возникнет жидкая фаза, в которой все частицы будут связаны друг с другом.

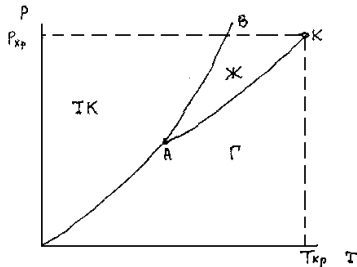


Рис. 7.6: Диаграмма агрегатных состояний равновесной однокомпонентной системы в p, T - координатах

На рис. 7.6 приведена диаграмма состояний для однокомпонентной системы простейшего вида с одной кристаллической фазой и одной тройной точкой A , в которой возможно равновесное сосуществование газовой, жидкой и кристаллической фаз. В критической точке K имеет место равновесное сосуществование газа (пара) и жидкости при наступлении тождественности этих фаз. Здесь возникает вопрос, какие области агрегатных состояний вещества и насколько точно можно описать на диаграмме рис. 7.6 с помощью вириального разложения (7.36). Ясно, что любое разложение по плотности (если считать плотность малым параметром) не годится для описания твердого тела. Поэтому

вблизи кривых AO и AB разложение (7.36) не применимо. Это можно подтвердить следующей оценкой: из модели твердых сфер следует, что регулярная (кристаллическая) плотная упаковка соответствует значениям величины $nb/4 = 0,7505$: в этом случае второй и седьмой коэффициенты (7.39) ряда (7.36) соответственно равны ~ 3 и ~ 10 , откуда можно предполагать, что ряд расходится. Из той же модели твердых сфер следует, что область существования жидкой фазы, ограниченной кривой AK , характеризуется значением параметра $nb = 1,8518$. Эта величина соответствует минимальному объему и максимальному отношению $p/nkT = 10,3$, при которых устойчива жидкая фаза. Тогда второй и седьмой члены ряда (7.39) соответственно равны $1,8518$ и $0,5564$, что указывает на возможность сходимости всего ряда. Однако, Майер и другие авторы не смогли на основе разложения (7.36) доказать существования конденсации в критической точке K . Расчеты с использованием вириального ряда (7.36) показывают также, что в области температур ниже критической значения термодинамических параметров могут заметно отличаться от экспериментальных и это отличие возрастает с ростом плотности. В следующем параграфе мы рассмотрим

другой подход в статистической теории плотных газов, не связанный непосредственно с необходимостью вычисления статистической суммы.

7.5 Функции распределения неидеальных газов

В 7.2 было показано, что при потенциале взаимодействия (7.1) для описания состояния систем многих частиц достаточно знать две первые функции распределения $F_1(x_1; t)$, $F_2(x_1, x_2; t)$. В равновесном случае одночастичная функция распределения является максвелловской и первый член выражения (7.12) для средней энергии системы равен энергии идеального газа. Поэтому для описания термодинамических свойств системы многих частиц необходимо знать только двухчастичную функцию распределения $F_2(x_1, x_2)$. Общее выражение для равновесной s -частичной функции распределения можно получить, если (7.16) подставить в (7.9) и проинтегрировать по импульсам $\mathbf{p}_{s+1} \dots \mathbf{p}_N$

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_s) = F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) \frac{\beta}{(2\pi m)^{3s/2}} \prod_{1 \leq i \leq s} \exp\left(-\frac{\beta p_i^2}{2m}\right), \quad (7.40)$$

где в правой части присутствует s -частичная функция распределения в координатном пространстве

$$F_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s) = \frac{V^s}{Q_N} \int_V \exp\left(-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}\right) d^3 r_{s+1} \dots d^3 r_N. \quad (7.41)$$

Цепочку уравнений для этих функций можно получить из цепочки уравнений (7.11) для равновесного случая. Для этого нужно воспользоваться выражением (7.40), произвести векторное дифференцирование по \mathbf{p}_i и проинтегрировать по \mathbf{p}_{s+1} . В результате получим

$$\sum_{1 \leq i \leq s} \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \left\{ \frac{\partial F_s}{\partial \mathbf{r}_i} + \beta \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi_{ij} \right) F_s + \beta \frac{N}{V} \int \frac{\partial \Phi_{i,s+1}}{\partial \mathbf{r}_i} F_{s+1} d^3 r_{s+1} \right\} = 0.$$

В силу независимости импульсов \mathbf{p}_i между собой выражение в фигурных скобках будет равно нулю и мы приходим к цепочке уравнений Боголюбова для равновесных функций распределения в конфигурационном пространстве [10], [7].

$$\frac{\partial F_s}{\partial \mathbf{r}_1} + \beta \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \left(\sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi_{ij} \right) F_s + \frac{\beta N}{V} \int \frac{\partial \Phi_{i,s+1}}{\partial \mathbf{r}_i} F_{s+1} d^3 r_{s+1} = 0. \quad (7.42)$$

Для короткодействующего потенциала, где имеется эффективный радиус взаимодействия между частицами r_0 , в интегральном члене уравнений (7.42) возникает параметр nr_0^3 , который является малым для газов в обычных условиях. Формально решение цепочки уравнений можно искать в виде ряда по плотности

$$F_s = F_s^{(0)} + F_s^{(1)} + F_s^{(2)} + \dots \quad (7.43)$$

Подставляя это разложение в уравнение (7.42) и собирая члены при одинаковых плотностях, получим

$$\frac{\partial F_s^{(0)}}{\partial \mathbf{r}_1} + \beta F_s^{(0)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi_{ij} = 0 \quad (7.44)$$

$$\frac{\partial F_s^{(1)}}{\partial \mathbf{r}_1} + \beta F_s^{(1)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi_{ij} + \beta \int \frac{\partial \Phi_{i,s+1}}{\partial \mathbf{r}_i} F_{s+1}^{(0)} d^3 r_{s+1} = 0.$$

Внешнее поле мы не будем рассматривать, поскольку оно не вносит принципиальных изменений в характер преобразований. Из первого уравнения этой системы непосредственно получается нулевое приближение

$$F_s^{(0)} = \gamma_s^{(0)} \exp \left(-\beta \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Phi_{ij} \right).$$

Для определения константы $\gamma_s^{(0)}$ воспользуемся определением (7.41). Если все $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| \rightarrow \infty$, то $\Phi_{ij} \rightarrow 0$, $Q_N \rightarrow V^N$, поэтому $F_s \rightarrow 1$ и, следовательно $\gamma_s^{(0)} = 1$. Выпишем выражения для двухчастичной и трехчастичной функций распределения в нулевом приближении

$$F_2^{(0)} = \exp(-\beta \Phi_{12}), \quad (7.45)$$

$$F_3^{(0)} = \exp[-\beta(\Phi_{12} + \Phi_{13} + \Phi_{23})], \quad (7.46)$$

Подставляя $F_s^{(0)}$ во второе уравнение системы (7.44), получим при $s = 2$ замкнутое уравнение для двухчастичной функции распределения. Заметим, что это уравнение можно записать в форме

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \left[F_2^{(1)} \exp(-\beta \Phi_{12}) - \int d^3 r_3 e^{-\beta(\Phi_{13} + \Phi_{23})} \right] = 0,$$

откуда

$$F_2^{(1)} \exp(\beta \Phi_{12}) = \int d^3 r_3 e^{-\beta(\Phi_{13} + \Phi_{23})} + \gamma_2^{(1)}.$$

Постоянная $\gamma_2^{(1)}$ определяется, если ввести функцию Майера (7.22), произвести замену координат $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$, $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3 = \mathbf{r}'$ и воспользоваться условиями $F_2^{(1)}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$, $f(|\mathbf{r}|) \rightarrow 0$ при $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Тогда

$$\gamma_2^{(1)} = - \int \exp[-\beta \Phi(|\mathbf{r}'|)] d^3 r'$$

и

$$F_2^{(1)} = \exp[-\beta \Phi(|\mathbf{r}|)] \int f(|\mathbf{r}'|) f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3 r'. \quad (7.47)$$

Аналогично находятся и другие коэффициенты разложения (7.43). Подставляя (7.45) и (7.47) в (7.43), приходим к приближенному выражению для двухчастичной функции распределения

$$F(r) \equiv F_2(|\mathbf{r}|) = \exp[-\beta \Phi(|\mathbf{r}|)] \left\{ 1 + n \int f(|\mathbf{r}'|) f(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) d^3 r' + \dots \right\}. \quad (7.48)$$

Функцию $F_2(|\mathbf{r}|)$ называют бинарной или радиальной функцией распределения. Мы будем пользоваться последним названием. Формула для давления в зависимости от радиальной функции распределения имеет вид [25]:

$$\beta p = n - \frac{2\pi n^2}{3} \beta \int_0^\infty \frac{d\Phi(r)}{dr} F(r) r^3 dr. \quad (7.49)$$

Если в (7.49) подставить выражение (7.48) и воспользоваться потенциалом твердых сфер, то получим два первых вириальных коэффициента (7.49).

Существует другой подход, позволяющий выразить уравнение состояния $p(n, \beta)$ через радиальную функцию распределения $F(r; n, \beta)$. Он основан на рассмотрении флуктуации числа частиц в некотором замкнутом объеме, находящемся внутри V . В результате устанавливается связь между изотермической сжимаемостью системы и радиальной функцией распределения [26]

$$\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial n}{\partial p} \right)_{\beta} = 1 + 4\pi n \int_0^{\infty} [F(r) - 1] r^2 dr. \quad (7.50)$$

Если функция $F(r; n, \beta)$ точная, то уравнения (7.49) и (7.50) должны давать одинаковую зависимость $p(n, \beta)$. Однако, если пользоваться приближенными значениями $F(r; n, \beta)$, то результаты могут оказаться отличающимися друг от друга. В этом случае можно попытаться подчинить функции $F(r, n, \beta)$ дополнительным условиям согласования. Однако для этого нужно рассматривать, по крайней мере, трехчастичные взаимодействия. Существует еще одно важное обстоятельство, связанное с формулой (7.50). Сюда явным образом не входит потенциал взаимодействия $\Phi(r)$ и, следовательно, он в принципе, может быть любым и определять вид радиальной функции $F(r, n, \beta)$.

Все предыдущие теоретические результаты относятся к случаю обычных неидеальных газов, когда цепочка уравнений (7.42) содержит малый параметр. Для жидкости необходим другой подход. Поиски эффективных методов расчета радиальной функции $F_2(r) = F(r)$ является главной задачей статистической теории жидкости. При этом, естественно, возникает проблема обрыва цепочки уравнений (7.42) и получения замкнутого уравнения для функции $F(r)$. Простейший способ обрыва был предложен Кирквудом и заключается в аппроксимации трехчастичной функции распределения произведением радиальных функций

$$F_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = F(|r_1 - r_2|)F(|r_1 - r_3|)F(|r_2 - r_3|). \quad (7.51)$$

Это приближение называется суперпозиционным. Смысл его заключается в том, что если записать

$$\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = -\beta \ln F_3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = -\beta \sum_{1 \leq i < j \leq 3} \ln F(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|),$$

то $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ можно интерпретировать как "потенциал средней силы", который обладает такими же свойствами как и основной потенциал взаимодействия (7.1). Исключая из второго уравнения цепочки (7.42) функцию F_3 и используя приближение (7.51), получим нелинейное интегральное уравнение Боголюбова-Борна-Грина, связывающее функции $F(r)$ и $\Phi(r)$ [10], [25]. Однако, даже для простейшего вида потенциала взаимодействия твердых сфер (7.24), это уравнение можно решить только с помощью ЭВМ. Кроме того, полученные численные результаты уступают по точности результатам некоторых других теорий. Поэтому более подробно указанную теорию мы здесь рассматривать не будем, а остановимся на двух других приближенных и интегральных уравнениях для функции $F(r)$, достаточно подробно изученных и считающихся наиболее точными. Это так называемое гиперцепное приближение и приближение Перкуса-Йевики [26], [33]. Оба уравнения можно получить из цепочки уравнений (7.42) с помощью суммирования бесконечной последовательности

майеровских диаграмм, или функциональными методами. Однако, чтобы избежать сложных и громоздких вычислений, мы выберем менее строгий, но более простой путь вывода этих уравнений. С этой целью воспользуемся уравнением Орнштейна и Цернике [22]

$$g(r) = C(r) + n \int C(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)g(r')d^3r', \quad (7.52)$$

где парная корреляционная функция

$$g(r) = F(r) - 1 \quad (7.53)$$

связывается с другой радиальной функцией $C(r)$, называемой прямой корреляционной функцией. Зная $g(r)$, мы можем найти $C(r)$ и наоборот. С этой точки зрения введение $C(r)$ просто расширяет набор понятий, используемых при изучении свойств жидкости, не углубляя наши представления о ней. Однако, это расширение оказалось очень полезным промежуточным звеном при построении теории жидкости. Очевидно, что все три функции $F(r)$, $g(r)$ и $C(r)$ несут одинаковую информацию о структуре и термодинамических свойствах системы. Введем в дополнение к уравнению (7.52) еще одну связь между прямой $C(r)$ и полной $g(r)$ корреляционными функциями

$$C(r) = g(r) - \ln[1 + g(r)] - \beta\Phi(r). \quad (7.54)$$

Если это выражение подставить в формулу (7.52), то получим замкнутое гиперцепное уравнение для функции $F(r)$

$$\ln F(r) + \beta\Phi(r) = n \int [F(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - 1] [F(r') - 1 - \ln F(r') - \beta\Phi(r')] d^3r'. \quad (7.55)$$

Уравнение Перкуса-Йевики получается, если положить

$$C(r) = F(r) [1 - \exp(-\beta\Phi(r))], \quad (7.56)$$

что вместе с (7.52) приводит к уравнению

$$F(r) \exp(-\beta\Phi(r)) = 1 + n \int [F(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - 1] F(r') [1 - \exp(-\beta\Phi(r))] d^3r'. \quad (7.57)$$

При выборе соотношений типа (7.54), (7.56) нужно, естественно, руководствоваться определенными принципами. Во-первых, найденная из (7.55) и (7.57), или из других приближенных уравнений, функция $F(r)$ должна приводить к правильным значениям нескольких первых членов разложения (7.48). Во-вторых, функция $F(r)$ должна иметь правильное асимптотическое поведение при $r \rightarrow \infty$. Оказывается, что это поведение можно проверить с помощью точного результата, который заключается в том, что на основе выражения (7.41) получено асимптотическое значение функции $g(r)$ вдали от критической точки [33]

$$g(r) = F(r) - 1 \rightarrow -\frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial n}{\partial p} \right)^2 \Phi(r)$$

при $r \rightarrow \infty$, где $(\partial n / \partial p)_T$ - изотермическая сжимаемость среды, потенциал взаимодействия $\Phi(r)$ не должен зависеть от плотности.

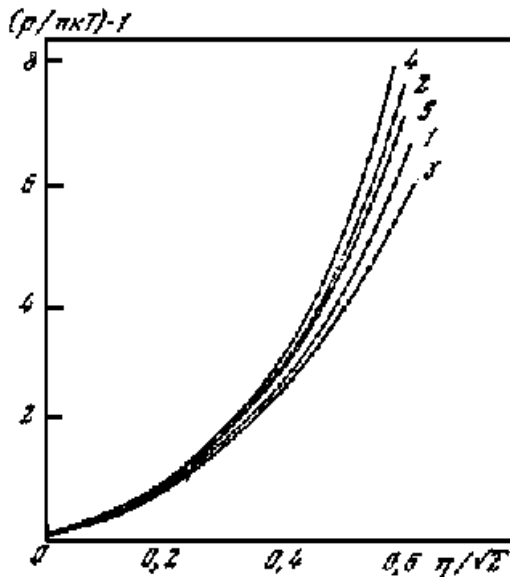


Рис. 7.7: Уравнение состояния системы твердых шаров [26]. 1 - теория Перкуса-Йевики, уравнение (7.49); 2 - теория Перкуса-Йевики, уравнение (7.50); 3 - гиперцепная теория, уравнение (7.49); 4 - гиперцепная теория, уравнение (7.50); 5 - расчеты по методу молекулярной динамики [31]

Всем этим требованиям соотношения (7.55) и (7.57) удовлетворяют. Уравнение Перкуса-Йевики (7.57) проще гиперцепного уравнения (7.55) и может быть получено из последнего, если положить $\ln[F(r) \exp(\beta\Phi(r))] \simeq F(r) \exp[-\beta\Phi(r)] - 1$. Поэтому уравнение (7.57) изучено более подробно и для потенциала твердых сфер (7.21) допускает точное решение. Если ввести функцию

$$\tau(r) = rF(r) \exp(\beta\Phi(r)), \quad (7.58)$$

которая остается конечной при $r < \sigma$, то подстановка этой функции при потенциале (7.21) в уравнение (7.57) приводит к уравнению [26]

$$\begin{aligned} \tau(x) = & \left[1 + 24\eta \int_0^1 \tau(x') dx' \right] x - \\ & - 12\eta \int_0^1 \tau(x') dx' \int_{|x-x'|}^{x+x'} \Theta(t-1) \tau(t) dt, \end{aligned} \quad (7.59)$$

где $\Theta(x)$ - функция Хевисайда ($\Theta(x) = 0$ при $x < 0$ и $\Theta(x) = 1$ при $x > 0$) и введены безразмерные единицы длины и плотности

$$x = \frac{r}{\sigma}, \quad \eta = \pi n \frac{\sigma^3}{6} < 1 \quad (7.60)$$

(для плотной упаковки шаров $\eta = 0,7405$). Решение уравнения (7.59) есть непрерывная кусочно-дифференцируемая функция с разрывами производных при целых значениях x . Поэтому задача сводится к нахождению из уравнения (7.59) последовательности функций $\tau_n(x)$, заданных каждая в интервале $n \leq x \leq n+1$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Вплоть до значений $\eta = 0,7405$ достаточно знать функцию, которая при $0 \leq x \leq 1$ оказывается равной

$$\begin{aligned} \tau_0(x) = & \frac{1}{2(1-\eta)^4} [2(1+2\eta)^2 x - \\ & - 3\eta(2+\eta)^2 x^2 + \eta(1+2\eta)^2 x^4]. \end{aligned} \quad (7.61)$$

Подстановка $\tau_0(x)$ в уравнения (7.12) и (7.49) приводит к результату

$$\beta E = \frac{3}{2} n; \quad \beta p = n \frac{1+2\eta+3\eta^2}{(1-\eta)^2}. \quad (7.62)$$

Плотность $\eta = 1$ соответствует сплошному заполнению веществом всего пространства; в этом предельном случае давление становится бесконечным. Такая плотность, конечно, не достижима, так как при регулярной плотной упаковке твердых сфер

$nv_0 = 1$ и $\eta = 2\sqrt{\pi/6} = 0,7405$, где $v_0 = \sigma^3/\sqrt{2}$ - объем, приходящийся на одну сферу в регулярной плотноупакованной системе N сфер.

Уравнение состояния можно получить и на основе соотношения (7.50). Принимая во внимание (7.21) и (7.58) - (7.61) и выполняя интегрирование, будем иметь

$$\beta p' = n \frac{1 + \eta + \eta^2}{(1 - \eta)^3}. \quad (7.63)$$

Как видно, формулы (7.62) и (7.63) не совпадают и $p' > p$. При малых плотностях давления близки, но с ростом плотности различие становится заметным и достигает 21. Это видно из рис. 7.7, где приведены зависимости $\beta p/n - 1$ от $\eta/\sqrt{2}$, построенные по уравнениям (7.62), (7.63), а также для гиперцепного приближения (7.55) и по результатам расчетов на ЭВМ по методу молекулярной динамики, который следует считать точным [31]. Видно, что уравнение Перкуса-Йевики дает лучшие результаты, особенно, если использовать соотношение (7.50) для сжимаемости. Важной величиной в теории плотных газов и жидкостей является структурный фактор

$S(k)$. Эта функция является фурье-образом корреляционной функции $g(r)$:

$$\begin{aligned} S(k) - 1 &= n \int g(r) e^{ik \cdot r} = \\ &= \frac{4\pi\eta}{k} \int_0^\infty [F(r) - 1] r \cdot \sin kr \cdot dr. \end{aligned}$$

Через $S(k)$ выражаются сечения когерентного рассеяния пучков рентгеновских лучей, а также электронов или медленных нейтронов в жидкости. Благодаря этому структурный фактор для реальных одноатомных жидкостей может быть определен экспериментально. Результаты расчетов функции $F(r, n, \beta)$ по аппроксимации Перкуса-Йевики (7.56) с потенциалом Леннарда-Джонса (7.14) хорошо совпадают с экспериментальными данными для реальных жидкостей. На рис. 7.8 приведено такое сравнение для аргона при нескольких значениях температуры и плотности. Результаты вполне удовлетворительны, а при высоких плотностях даже улучшаются.

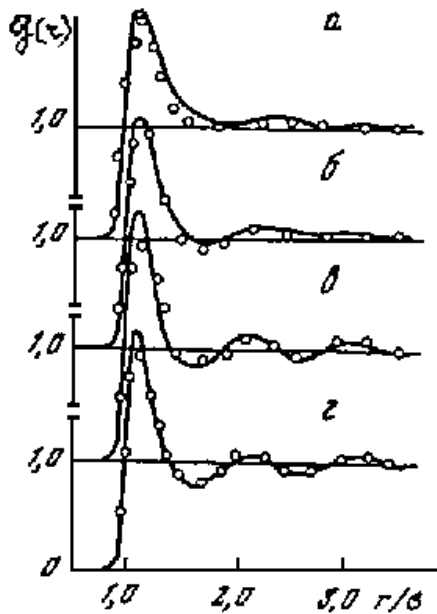


Рис. 7.8: Сравнение радиальной функции распределения по уравнению Перкуса-Йевики с потенциалом Леннарда-Джонса (сплошные линии) с рассчитанной по экспериментальным данным для аргона (точки)[35] а - $T^* = 1,361, n^* = 0,167$; б - $T^* = 1,319, n^* = 0,319$; в - $T^* = 1,19461, n^* = 0,541$; г - $T^* = 1,277, n^* = 0,541$;

При наличии сил притяжения между частицами аппроксимация Перкуса-Йевики описывает фазовый переход жидкость-пар, а также и существование критической точки.

Глава 8

Термодинамика квантовых систем

8.1 Статистическое описание квантовых систем заряженных частиц

Система заряженных частиц (плазма) принципиально отличается от нейтральных газов и жидкостей. Отличия связаны с дальнедействующим характером кулоновского потенциала, что проявляется в коллективности взаимодействия (в нем участвуют много частиц) и в квантовом характере взаимодействия на малых расстояниях между отрицательно и положительно заряженными частицами. В качестве примера рассмотрим плазму, состоящую из электронов и соответствующего количества положительно заряженных ядер при температуре достаточно близкой к абсолютному нулю [39]. Средняя энергия кулоновского взаимодействия электронов с ядрами (отнесенная к одному электрону) равна $\Phi_0 \sim Ze^2/(Zn^{-1})^{1/3}$, где Z - число зарядов ядра, $(Zn^{-1})^{1/3}$ - среднее расстояние между электронами и ядрами. Вместо температуры здесь нужно взять среднюю кинетическую энергию электронов $E_F = p_F^2/2m = \hbar^2/2m n^{2/3}$, p_F - импульс Ферми. Тогда условием малости взаимодействия будет являться неравенство

$$\frac{Ze^2}{E_F(Zn^{-1})^{1/3}} \ll 1,$$

откуда следует

$$n \gg \left(\frac{e^2 m}{\hbar^2}\right)^3 Z^2,$$

т.е. в отличие от классических систем, взаимодействие между электронами и ядрами тем меньше, чем больше плотность частиц. Из приведенного примера видно, что при определенных условиях (в данном случае этим условием является температура близкая к абсолютному нулю) возникает необходимость квантового подхода при рассмотрении системы многих частиц. Такая необходимость возникает в случае больших чисел заполнения квантовых состояний (как в данном примере), а также, если столкновение частиц происходит по квантовым законам. Большие числа заполнения соответствуют распределениям Ферми-Дирака для фермионов или Бозе-Эйнштейна для бозонов. Только в предельном случае малых чисел заполнения справедливо распределение Максвелла-Больцмана. Применимость этого распределения определяется условием $n\lambda^3 \ll 1$, где $\lambda = (2\pi\hbar^2\beta/m)^{1/2}$ - длина волны де-Бройля. Квантовый или классический характер взаимодействия зависит от того, каким законам подчиняется

движение взаимодействующих частиц на малых расстояниях. Например, классический характер взаимодействия между заряженными частицами определяется неравенством $\beta e^2/n^{-1/3} \ll 1$, где βe^2 - амплитуда кулоновского рассеяния, характеризующая наименьшее расстояние, на котором заряженная частица рассеивается, т.е. остается еще свободной. В квантовой механике состояние динамической системы определяется волновой функцией Ψ , которая является функцией t времени, координат частиц $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$, дискретных спиновых переменных $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$. Обозначения, связанные с последними, мы опускаем и будем вводить там, где будет необходимо. Функция $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad (8.1)$$

где \hat{H} - гамильтониан, который является оператором

$$\hat{H} = \sum_{1 \leq i \leq N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \Delta_{\mathbf{r}_i} + U_i(\mathbf{r}_i) \right) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \quad (8.2)$$

$$\Delta_{\mathbf{r}_i} = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}$$

- оператор Лапласа возникает при замене импульсов, фигурирующих в классическом гамильтониане (7.10), на операторы

$$\mathbf{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}. \quad (8.3)$$

Уравнение Шредингера полностью определяет Ψ в любой момент времени t , если она известна в начальный момент $t = 0$. Волновая функция позволяет получить вероятностное представление о состоянии системы частиц, так как выражение

$$|\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)|^2 d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_N$$

является вероятностью того, что в любой момент времени t координаты системы $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$ находятся в бесконечно малом объеме $d^3 r_1, d^3 r_2, \dots, d^3 r_N$. Условием нормировки является

$$\int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t)|^2 d^3 r_1, d^3 r_2, \dots, d^3 r_N = 1. \quad (8.4)$$

Любой физической величине f (координате, импульсу, гамильтониану и т.д.) соответствует определенный линейный оператор \hat{f} (для импульса (8.3), для гамильтониана (8.2)). Среднее значение величины f определяется выражением

$$\langle f(t) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) \hat{f} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; t) d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_N. \quad (8.5)$$

Здесь оператор \hat{f} не зависит от времени, но эта зависимость имеется в волновой функции Ψ , удовлетворяющей нестационарному уравнению Шредингера. Поскольку величина $\Psi(t)$ входит во все формулы для средних значений, то от времени будут зависеть и наблюдаемые свойства системы. Такой подход называется представлением

Шредингера. Звездочка означает комплексно сопряженную величину. Для вещественных физических величин соответствующие операторы \hat{f} и их средние значения $\langle f \rangle$ также являются вещественными, поэтому $\langle f \rangle = \langle f \rangle^*$. Отсюда следует, что операторы, соответствующие вещественным физическим величинам, являются эрмитовыми операторами. Кроме представления Шредингера, в квантовой механике существует эквивалентное представление Гейзенберга, в котором зависимость от времени перенесена с волновой функции на операторы. В этом случае формула (8.5) для среднего значения имеет вид:

$$\langle f(t) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; 0) \hat{f} \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; 0) d^3 r_1 d^3 r_2 \dots d^3 r_N, \quad (8.6)$$

где $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N; 0)$ - волновая функция в начальный момент времени $t = 0$, оператор $\hat{f}(t)$ удовлетворяет уравнению [39]

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{f} \hat{H} - \hat{H} \hat{f}] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{f} \hat{H}]. \quad (8.7)$$

Здесь введены квантовые скобки Пуассона. В частности, если в качестве оператора $\hat{f}(t)$ взять координату $\mathbf{r}_i(t)$, а затем оператор импульса (8.3), то из (8.7) получаем соответственно два операторных уравнения

$$\frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = [\hat{H}, \mathbf{r}_i], \quad \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = [\hat{H}, \mathbf{p}_i], \quad (8.8)$$

аналогичные уравнениям Гамильтона в классической механике. Из формул (8.5) и (8.6) видно, что для вычисления средних значений необходимо знать произведение функций $\Psi \Psi^*$. Поэтому удобнее использовать не уравнение Шредингера (2.1) для нахождения функций Ψ и Ψ^* , а уравнение для функции [39]

$$\rho_N(q, q'; t) = \Psi(q, t) \Psi^*(q', t), \quad (8.9)$$

где для сокращения записи введены обозначения $q = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$, $q' = \{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N\}$. Эта функция называется матрицей плотности и в квантовой механике она играет роль, подобную функции распределения D_N в классической механике. Если продифференцировать (8.9) по времени и использовать уравнение Шредингера (8.1) для функций Ψ и Ψ^* , то получим квантовое уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial \rho_N}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} (\hat{H} \rho_N - \rho_N \hat{H}) = \frac{1}{i\hbar} [\hat{H}, \rho_N], \quad (8.10)$$

которое по форме отличается от классического (7.8) тем, что вместо классических скобок, присутствуют квантовые скобки Пуассона и имеется множитель $1/i\hbar$. Кроме того, матрица плотности ρ_N является комплексной функцией координат q и q' , в то время как D_N - действительная функция координат импульсов. Различие между уравнениями (8.7) и (8.10), заключающееся в изменении порядка следования операторов в коммутаторе, имеет ясный физический смысл. Оно означает, что матрица плотности ρ_N есть не динамическая переменная, а обобщенная функция состояния и что, следовательно, она изменяется во времени в представлении Шредингера. Разумеется, в представлении Гейзенберга матрица плотности является постоянной во

времени (с помощью матрицы плотности (8.9) возможно описание замкнутых систем, обладающих волновой функцией - такое состояние называют чистым). Но могут быть ситуации, когда системе нельзя приписать волновую функцию $\Psi(q, t)$. Например, наблюдаемая величина может относиться к малой области, расположенной внутри большого объема газа. Для того чтобы описать эту систему в рамках обычной квантовой механики, надо было бы включить ее в весь объем газа, который представляет собой уже замкнутую систему, обладающую волновой функцией. Для описания такой замкнутой системы нужен дополнительный набор динамических переменных $y = \{y_1, \dots, y_s\}$. В этом случае матрица плотности определяется посредством

$$\rho_N(q, q'; t) = \int \Psi(q, y; t) \Psi^*(q', y; t) dy, \quad (8.11)$$

которая удовлетворяет тому же уравнению (8.10). Таким образом, состояния незамкнутой системы (их называют **смешанными**) обладают лишь матрицей плотности и для них нельзя осуществить полную систему измерений. Из определения (8.11) следует, что матрица плотности обладает свойством "эрмитовости"

$$\rho_N^*(q, q', t) = \rho_N(q', q, t). \quad (8.12)$$

Диагональные элементы этой матрицы

$$\rho_n(q, q, t) = Sp \rho_N = \int |\Psi(q, y)|^2 dy$$

определяют распределение вероятности для координат системы. Здесь введен шпур (след) Sp , обозначающий сумму диагональных элементов. С помощью матрицы плотности определяется среднее значение любой физической величины

$$\bar{f} = \int [\hat{f} \rho_N(q, q', t)]_{q'=q} d^3 q, \quad (8.13)$$

где \hat{f} действует только на переменные q . После такого воздействия нужно положить $q' = q$. Рассмотрим более подробно уравнение (8.10). Перепишем его в виде

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} + \hat{H}^* \right) \rho_N(q, q'; t) = 0, \quad (8.14)$$

где \hat{H} - оператор Гамильтона (8.2), а \hat{H}^* - тот же оператор, действующий на штрихованные переменные. В квантовомеханическом случае, так же как и в классическом, на основании уравнения Лиувилля (8.10) можно получить цепочку уравнений для s -частичных функций распределения, которые по форме определяются аналогично классическим (7.11) [7]

$$\left\{ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{j=1}^s \left(\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_j^2} - \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}'_j{}^2} \right) - \sum_{1 \leq i < j \leq N} [\Phi_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) - \Phi_{ij}(|\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j|)] \right\} \\ \rho_s(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_s; \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_s; t) = \frac{N}{V} \int \sum_{1 \leq j \leq s} d^3 r_{s+1} [\Phi_{j,s+1}(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{s+1}|) - \Phi_{j,s+1}(|\mathbf{r}'_j - \mathbf{r}'_{s+1}|)] \\ \rho_{s+1}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{s+1}; \mathbf{r}'_1, \dots, \mathbf{r}'_{s+1}; t). \quad (8.15)$$

Наиболее близко к классической цепочке уравнений (7.11) получается квантовомеханическая цепочка уравнений для матрицы плотности в смешанном координатно-импульсном представлении, предложенном Вигнером. В этом представлении матрица плотности определенным образом связывается с матрицей плотности (8.9) в координатном представлении [1].

8.2 Основные уравнения квантовой статистики

В 8.1 мы уже касались условий, при которых возникает необходимость квантового подхода при рассмотрении системы многих частиц. Здесь нас будет интересовать система заряженных частиц (плазма), находящаяся в равновесии при некоторой конечной температуре. В отличие от нейтральных газов в плазме силы взаимодействия между заряженными частицами являются дальнедействующими, благодаря чему, эффекты, связанные с взаимодействием, при температурах $\sim 10^4 K$ могут быть значительными уже при плотностях заряженных частиц $\sim 10^{18} \text{см}^{-3}$. При этом взаимодействие между электронами и ионами нужно рассматривать на основе законов квантовой механики, поскольку на расстояниях меньших кулоновской амплитуды рассеяния βe^2 могут возникать связанные состояния. Кроме того, состояния электронов характеризуются уже конечными числами заполнения и, таким образом, начинают проявляться эффекты статистики Ферми-Дирака. В 7.4 рассмотрено для равновесного случая формальное решение (7.16) классического уравнения Лиувилля (7.8). В квантовой механике ему соответствует уравнение для матрицы плотности (8.10). Решение последнего по форме можно записать в таком же виде

$$\rho_N = \frac{1}{Z_N} \exp\{-\beta \hat{H}\} \quad (8.16)$$

и рассматривать как квантовое распределение Гиббса. Операторы ρ_N и \hat{H} являются коммутирующими, причем по определению оператор

$$e^{-\beta \hat{H}} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k / k! (\beta \hat{H})^k.$$

Z_N - является нормирующим множителем и соответствует статистической сумме, определяющей все термодинамические свойства квантовой системы. Заметим, что квантовая статистическая сумма, в отличие от классической, является безразмерной величиной. Введем ненормированную матрицу плотности и рассмотрим ее как функцию параметра β [24]

$$\rho'_N(\beta) = e^{-\beta \hat{H}}. \quad (8.17)$$

Дифференцируя это равенство по β , получим уравнение

$$\frac{\partial \rho'_N}{\partial \beta} = -\hat{H} \rho'_N. \quad (8.18)$$

Начальное условие для него имеет вид

$$\rho'_N(0) = 1. \quad (8.19)$$

Это известное уравнение Блоха; оно превращается в уравнение Шредингера (8.1), если β заменить на it/\hbar . Такая формальная аналогия позволяет использовать многие

методы решения уравнения Шредингера для вычисления матрицы плотности ρ'_N . Уравнение (8.18) можно записать в координатном представлении

$$\frac{\partial \rho'_N(q, q'; \beta)}{\partial \beta} = -\hat{H} \rho'_N(q, q'; \beta), \quad (8.20)$$

где для наборов координат введены обозначения $q = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$, $q' = \{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \dots, \mathbf{r}'_N\}$. Оператор \hat{H} действует только на переменные q . Начальным условием для этого уравнения является

$$\rho'_N(q, q'; 0) = \delta(\mathbf{q} - \mathbf{q}'). \quad (8.21)$$

Решение уравнения (8.20) с граничным условием (8.21) имеет вид

$$\rho'_N(q, q'; \beta) = \sum_{\{n\}} e^{-\beta E_n} \Psi_n(q) \Psi_n^*(q'). \quad (8.22)$$

Здесь Ψ_n, E_n соответственно ортонормированные собственные волновые функции и собственные значения уравнения $\hat{H} \Psi_n = E_n \Psi_n$; $\{n\} = n_1, n_2, \dots, n_N$ - набор квантовых чисел, характеризующих состояния системы с волновыми функциями $\Psi_{n_1}, \Psi_{n_2}, \dots, \Psi_{n_N}$, на которые может быть разложена полная волновая функция системы. Далее из условия нормировки

$$\int \rho_N(q, q; \beta) dq = \frac{1}{Z_N} \int \rho'_N(q, q; \beta) dq = 1,$$

если использовать решение (8.22) и ортонормированность функций $\Psi_n(q)$, получается выражение для статистической суммы

$$Z_N = \sum_{\{n\}} \int e^{-\beta E_n} \Psi_n(q) \Psi_n^*(q) dq = \sum_{\{n\}} e^{-\beta E_n} = \text{Spe}^{-\beta E_n}. \quad (8.23)$$

При изучении квантовых систем удобно использовать большой канонический ансамбль для систем с переменным числом частиц. Матрица плотности для этого ансамбля определяется следующим образом

$$\rho = \frac{1}{Z_G} \sum_{N=0}^{\infty} \exp \left\{ -\beta (\hat{H} - \mu \hat{N}) \right\} = \frac{1}{Z_G} \sum_{N=0}^{\infty} z^N \rho_N, \quad (8.24)$$

где μ - химический потенциал, $z = \exp(\beta \mu)$ - активность. Возможность последнего равенства определяется коммутативностью операторов \hat{H} и \hat{N} . Шпур от оператора $e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}$ определяет "большую статистическую сумму"

$$Z_G = \text{Spe}^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} = \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{\{n\}} \exp[-\beta(E_{n,N} - \mu N)] = \sum_{N=0}^{\infty} z^N Z_N. \quad (8.25)$$

В квантовой механике для приближенного решения многих задач используется теория возмущений [39]. Эта теория применяется в том случае, если гамильтониан системы можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (8.26)$$

и рассматривать \hat{H}_1 как малую поправку (возмущение) к оператору \hat{H}_0 . При этом предполагается, что задача с оператором \hat{H}_0 решается точно. Чтобы развить теорию

возмущений для статистической суммы (8.25), удобно перейти к "представлению взаимодействия", полагая, что в гамильтониане (8.2) роль \hat{H}_0 играют операторы кинетической энергии и потенциальной энергии внешнего поля, а малой поправкой \hat{H}_1 является потенциальная энергия взаимодействия частиц

$$\hat{H}_1 = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|). \quad (8.27)$$

Введем оператор как функцию обратной температуры β

$$R(\beta) = \exp [\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})] \exp [-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})]. \quad (8.28)$$

Дифференцируя это равенство по β и учитывая (8.26) (8.27), получим уравнение Блоха в представлении взаимодействия

$$\frac{\partial R}{\partial \beta} = -e^{\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} (\hat{H} - \hat{H}_0) e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} = -\hat{H}_1(\beta) R(\beta), \quad (8.29)$$

где

$$\hat{H}_1(\beta) = \exp [\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})] \hat{H}_1 \exp [-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})]. \quad (8.30)$$

Вместе с условием $R(0) = 1$ уравнение (8.29) эквивалентно интегральному уравнению

$$R(\beta) = 1 - \int_0^\beta \hat{H}_1 R(\beta) d\beta. \quad (8.31)$$

Применяя к (8.31) итерационную процедуру, приходим к решению

$$R(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^{\beta_1} d\beta_2 \dots \int_0^{\beta_{n-1}} d\beta_n \hat{H}_1(\beta_1) \dots \hat{H}_1(\beta_n). \quad (8.32)$$

Перепишем это решение в более удобной форме

$$R(\beta) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \dots \int_0^\beta d\beta_1 \dots d\beta_n T [\hat{H}_1(\beta_1) \dots \hat{H}_1(\beta_n)]. \quad (8.33)$$

Оператор T , присутствующий в этом выражении, называют обычно оператором упорядочения. Он располагает операторы $\hat{H}_1(\beta_i)$ в порядке убывания переменных β_i . Слева направо $\beta > \beta_1 > \beta_2 > \dots > \beta_n > 0$. Смысл перехода от (8.32) к (8.33) состоит в том, что вводится общий для всех интегралов верхний предел β . Формальное доказательство эквивалентности выражений (8.32) и (8.33) можно построить методом индукции. Введем большую статистическую сумму системы невзаимодействующих частиц

$$Z_G^0 = Sp \exp [-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})] \quad (8.34)$$

и обозначение для средней величины по большому каноническому ансамблю системы невзаимодействующих частиц

$$\langle T [\hat{H}_1(\beta_1) \dots \hat{H}_1(\beta_n)] \rangle_0 = \frac{Sp \exp [-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})] T [\hat{H}_1(\beta_1) \dots \hat{H}_1(\beta_n)]}{Sp \exp [-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})]}. \quad (8.35)$$

Тогда, учитывая (8.25), (8.28) и (8.35), будем иметь [1],[12]

$$\frac{Z_G}{Z_G^0} = \langle R(\beta) \rangle_0 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \dots \int_0^\beta d\beta_1 \dots d\beta_n \langle T [\hat{H}_1(\beta_1) \dots \hat{H}_1(\beta_n)] \rangle_0. \quad (8.36)$$

Выражение (8.36) носит формальный характер и для его использования в практических расчетах требуется определенным образом преобразовать оператор (8.30) и операторное произведение в подинтегральном выражении.

8.3 Метод вторичного квантования в статистической физике

В настоящем параграфе рассматривается применение метода вторичного квантования к анализу ряда теории возмущений для большой статистической суммы. Следующим шагом, позволяющим приблизиться к практическим расчетам членов ряда теории возмущений для большой статистической суммы (8.36), является использование метода вторичного квантования. Прежде всего запишем необходимые для дальнейших исследований соотношения, которые являются основными в методе вторичного квантования [1]. Здесь роль независимых переменных играют не координаты частиц, а числа частиц $N_1, N_2, \dots, N_k, \dots$ (числа заполнения) в различных квантовых состояниях $1, 2, \dots, k, \dots$. Состояния системы описываются волновой функцией $\Psi(N_1, N_2, \dots, N_k, \dots)$, симметричной для бозонов и антисимметричной для фермионов. Квадрат модуля $|\Psi|^2$ определяет вероятности различных значений чисел N_1, N_2, \dots . При таком выборе независимых переменных операторы различных физических величин должны формулироваться в терминах их воздействия на функции чисел заполнения. Мы не будем излагать подробно указанный метод, отсылая читателя к соответствующей литературе (см. например, [1]). Рассмотрим лишь необходимые для дальнейших исследований квантовополевые операторы и укажем их свойства. Основными операторами в методе вторичного квантования являются операторы уничтожения частиц $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ и рождения частиц $\hat{a}_{\mathbf{k}}^+$. Эти операторы удовлетворяют соотношениям коммутации

$$\hat{a}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{q}}^+ - \eta\hat{a}_{\mathbf{q}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{q}} - \eta\hat{a}_{\mathbf{q}}\hat{a}_{\mathbf{k}} = 0, \quad \hat{a}_{\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{q}}^+ - \eta\hat{a}_{\mathbf{q}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}}^+ = 0, \quad (8.37)$$

где $\eta = 1$ для бозонов и $\eta = -1$ для фермионов, δ_{kq} - символ Кронекера, нижние индексы ($\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$) указывают, что данный оператор описывает одночастичное состояние с импульсом \mathbf{p} , который является параметром. Таким образом, с помощью указанных операторов можно строить теорию в терминах чисел заполнения, используя импульсное представление для физических величин. Перестановочные соотношения (8.37) для фермионов соответствуют тому условию, что в данном энергетическом состоянии должно находиться не более одной частицы $\hat{H}_k^2 = \hat{H}_k$. С помощью оператора $\hat{a}_{\mathbf{q}}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{k}}$ можно ввести, так называемые, Ψ - операторы [1], где координаты \mathbf{r} рассматриваются как параметры. Поскольку амплитуда вероятности для невзаимодействующей частицы с импульсом \mathbf{k} равна $(1/\sqrt{V})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, то указанные операторы можно представить в виде разложений

$$\hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (8.38)$$

Оператор $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ уничтожает частицу, а оператор $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$ создает частицу в точке поля \mathbf{r} . Они удовлетворяют соотношениям коммутации, аналогичным (8.37)

$$\begin{aligned}\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) - \eta\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) &= \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \\ \hat{\Psi}(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2) - \eta\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1) &= 0, \\ \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2) - \eta\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1) &= 0,\end{aligned}\tag{8.39}$$

где $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ - дельта-функция. Эти операторы используются в том случае, когда теория строится в терминах чисел заполнения в координатном представлении. Далее нам потребуются выражения для числа частиц и гамильтониана (8.2) через операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$. Число заполнения $N_{\mathbf{k}}$ и плотность числа частиц $n(\mathbf{r})$ в точке \mathbf{r} определяется соответственно выражениями

$$N_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}}; \quad n(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r}).\tag{8.40}$$

Полное число частиц равно

$$\hat{N} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}} = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})\hat{\Psi}(\mathbf{r})d^3r.\tag{8.41}$$

Исходя из описанных свойств операторов (8.37) - (8.41), кинетическую энергию и потенциальную энергию внешнего поля, действующую на каждую частицу в отдельности, можно записать следующим образом

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}N_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}N_{\mathbf{k}} = \\ &= - \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})\Delta\hat{\Psi}(\mathbf{r})d^3r + \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})U\hat{\Psi}(\mathbf{r})d^3r,\end{aligned}\tag{8.42}$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2/2m = p^2/2m$ - кинетическая энергия частицы, $U_{\mathbf{k}}$ - потенциал внешнего поля в импульсном представлении. Оператор (8.27) в представлении вторичного квантования отличается от \hat{H}_0 тем, что потенциал $\Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ относится к паре частиц и действует на функции от \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j . Такой оператор может быть выражен через операторы $\hat{a}_{\mathbf{k}}, \hat{a}_{\mathbf{k}}^+$ и $\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$ посредством

$$\hat{H}_1 = \frac{1}{2V} \sum_{\{\mathbf{k}\}} u_{\mathbf{k}}\hat{a}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{k}}^+\hat{a}_{\mathbf{k}_2}\hat{a}_{\mathbf{k}_1} = \frac{1}{2} \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1)\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}_1)\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_2)\hat{\Psi}(\mathbf{r}_1)d^3r_1d^3r_2.\tag{8.43}$$

В первом выражении в правой части суммирование производится по всем импульсам $\{\mathbf{k}\} = \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}$. Кроме того сюда входит фурье-образ потенциала $\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, зависящего лишь от относительного расстояния $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

$$u_{\mathbf{k}} = \int \Phi(|\mathbf{r}|)e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3r.\tag{8.44}$$

С физической точки зрения данное представление \hat{H}_1 описывает процессы столкновения двух частиц с импульсами \mathbf{k}_1 и \mathbf{k}_2 , при котором происходит передача импульса \mathbf{k} , но полный импульс сохраняется, так что импульсы принимают значения $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}$. Отметим, что все основные формулы (8.40)-(8.44), которые нам потребуются в

дальнейшем, применимы как к бозонам, так и к фермионам. Чтобы избежать излишней громоздкости записи формул, мы не рассматривали зависимости от спиновых координат, которые так же как и \mathbf{k}, \mathbf{r} , являются в методе вторичного квантования параметрами. Однако, это не нарушает общности приведенных формул. Действительно, если физическая величина зависит от импульсов (или координат) и обладает спином σ , то каждому импульсу \mathbf{k}_i соответствует компонента спина σ_i (или координате \mathbf{r}_i). Поэтому в формулах всегда можно учесть указанную зависимость. Если в формулах присутствует суммирование по импульсам или интегрирование по координатам, необходимо добавлять суммирование по компонентам спинов. Применим теперь изложенный аппарат для представления общего члена ряда (8.33) в терминах метода вторичного квантования. Заметим, что этот ряд соответствует символическому разложению экспоненты

$$R(\beta) = T \exp \left[- \int \hat{H}_1(\beta_1) d\beta_1 \right], \quad (8.45)$$

поэтому все необходимые преобразования достаточно проделать для показателя экспоненты, а затем результат можно представить опять в виде ряда. В дальнейшем нам будет удобнее пользоваться координатным представлением, т.е. использовать операторы (8.38). Подставляя в выражение (8.30) второе из равенств (8.43), будем иметь

$$\hat{H}_1(\beta_1) = \frac{1}{2} \int d^3 r_1, d^3 r_2 \Psi^+(\mathbf{r}_1, \beta_1) \Psi^+(\mathbf{r}_2, \beta_1) \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \Psi(\mathbf{r}_2, \beta_1) \Psi(\mathbf{r}_1, \beta_1), \quad (8.46)$$

где введены новые операторы в представлении взаимодействия

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(\mathbf{r}, \beta) &= \exp \left[\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N}) \right] \Psi(\mathbf{r}) \exp \left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N}) \right], \\ \bar{\Psi}^+(\mathbf{r}, \beta) &= \exp \left[\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N}) \right] \Psi^+(\mathbf{r}) \exp \left[-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N}) \right]. \end{aligned} \quad (8.47)$$

По аналогии с временными операторами, удовлетворяющими уравнению (8.7), эти операторы также можно назвать гейзенберговскими, если "временем" считать величину β . Они подчиняются тем же правилам коммутации (8.39), что и операторы $\hat{\Psi}, \hat{\Psi}^+$. Вместо потенциала $\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ удобно ввести зависящий от β потенциал

$$\Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, \beta_1 - \beta_2) = \delta(\beta_1 - \beta_2) \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|). \quad (8.48)$$

Используя (8.28), гамильтониану взаимодействия (8.26) и оператору (8.45) можно придать симметричную форму по отношению к координатам и обратным температурам частиц. Это позволяет ввести для них обозначения

$$i = \{\mathbf{r}_i, \beta_i\}, \quad \int di = \int_0^\beta d\beta_i \int d^3 r_i. \quad (8.49)$$

Учитывая (8.46), (8.48) и (8.49), оператор (8.45) можно записать в виде

$$R(\beta) = T \exp \left[-\frac{1}{2} \int d1 d2 \Psi^+(1) \Psi^+(2) \Phi(1, 2) \bar{\Psi}(2) \bar{\Psi}(1) \right]. \quad (8.50)$$

Если разложить экспоненту (8.50) в ряд, затем взять среднее по формуле (8.35), то для большой статистической суммы (8.36) получим следующее выражение

$$\frac{Z_G}{Z_G^0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} C_n, \quad (8.51)$$

где введено обозначение

$$C_n = (-1)^n \int \prod_{i=1}^n didi' \left\langle T \left(\bar{\Psi}^+(i) \bar{\Psi}^+(i') \Phi(i, i') \bar{\Psi}(i') \bar{\Psi}(i) \right) \right\rangle_0. \quad (8.52)$$

Как видно, в подинтегральное выражение (8.52) входит произведение из n парных потенциалов взаимодействия $\Phi(i, i')$ и $4n$ операторов уничтожения $\bar{\Psi}(i)$ и рождения частиц $\bar{\Psi}^+(i)$ в представлении взаимодействия, взятых в различных пространственных и температурных точках. Отметим, что в формуле (8.52) среднее вычисляется с помощью оператора системы невзаимодействующих частиц $e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})}$. Эти средние обращаются в нуль за исключением тех случаев, когда число операторов рождения равно числу операторов уничтожения в тех же состояниях. Статистическое среднее от пары операторов называется спариванием. Спаривания $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_0$, $\langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle_0$, в силу двух последних условий (8.37), равны нулю. Отличны от нуля следующие спаривания

$$\begin{aligned} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle_0 &= \langle N_{\mathbf{k}} \rangle_0 = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - \eta}, \\ \langle \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \rangle_0 &= \langle 1 + \eta N_{\mathbf{k}} \rangle_0 = \frac{1}{1 - \eta e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}, \end{aligned} \quad (8.53)$$

где $\eta = -1$ для фермионов и $\eta = 1$ для бозонов, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, $\langle N_{\mathbf{k}} \rangle_0$ - средние числа заполнения по большому каноническому ансамблю системы невзаимодействующих частиц. Важным обстоятельством при выводе формул (8.52) и (8.53) является неизменность среднего значения (шпура) при циклических перестановках операторов. Например, [12]

$$Sp \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \right] = Sp \left[\hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \right] = Sp \left[e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{a}_{\mathbf{k}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ e^{-\beta(\hat{H} - \mu\hat{N})} \right].$$

Поэтому имеем

$$\begin{aligned} Sp \left[e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}} \right] &= e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} Sp \left[e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \right] = \\ &= e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} Sp \left[e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu\hat{N})} (1 + \eta \hat{a}_{\mathbf{k}}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}}) \right]. \end{aligned} \quad (8.54)$$

Учитывая (8.38) и (8.39), можно показать, что этими же свойствами обладают и операторы $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$, $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$, а также операторы (8.47) в гейзенберговском представлении.

8.4 Термодинамическая диаграммная техника

В этом разделе вычислим термодинамический потенциал системы частиц, используя метод функций Грина и диаграммную технику. Для построения полной термодинамики квантовой системы многих частиц удобнее вычислять вместо Z_G термодинамический потенциал Ω как функцию переменных β , μ и V . Потенциал Ω связан с "большой статистической суммой" известным соотношением [18]

$$-\beta\Omega = \ln Z_G. \quad (8.55)$$

Логарифмируя равенство (8.51), можно записать

$$-\beta\Delta\Omega = -\beta(\Omega - \Omega_0) = \ln \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} C_n \right], \quad (8.56)$$

где Ω_0 - термодинамический потенциал системы невзаимодействующих частиц, $\Delta\Omega$ - вклад в термодинамический потенциал от взаимодействия между частицами. Главной задачей является вычисление среднего от произведения операторов в выражении (8.52). Для этого нужно использовать правила спаривания (8.53) и циклические перестановки операторов для средних значений (8.54). Обозначим через $A_{\mathbf{k}}$ любой из рассматриваемых в 8.3 операторов рождения и уничтожения частиц и объединим все соотношения коммутации (8.37) - (8.39) в одно выражение

$$A_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{q}} - \eta A_{\mathbf{q}}A_{\mathbf{k}} = \delta(\mathbf{k}, \mathbf{q}),$$

$$\delta(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \begin{cases} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} & \text{— для фермионов} \\ \pm\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} & \text{— для бозонов (плюс для } A_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}, \text{ минус для } A_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^+) \end{cases}. \quad (8.57)$$

В итоге, вместо (8.53), получаем формулу, обобщающую спаривание всех рассмотренных операторов рождения и уничтожения частиц [12]

$$\langle A_{\mathbf{k}}A_{\mathbf{q}} \rangle_0 = \frac{\delta(\mathbf{k}, \mathbf{q})}{1 - \eta (e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)})^{\pm 1}}, \quad (8.58)$$

где "плюс" или "минус" соответственно относится к $A_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}$ и $A_{\mathbf{k}} = \hat{a}_{\mathbf{k}}^+$. Проблема приведения произведения операторов в выражении (8.52) к виду, позволяющему приступить к практическим расчетам, заключается в определении суммы произведений спариваний. Эта процедура является содержанием теоремы Вика [1], [12]. При этом необходимо соблюдать следующие правила (для фермионов):

1. Оператор $A_{\mathbf{k}}$ в произведении переносится в крайнее правое положение.
2. При перестановке пары операторов добавляется знак минус.
3. Оператор $A_{\mathbf{k}}$ в произведении переносится в крайнее левое положение.

Эти правила распространяются и на большее число операторов. Например, среднее от произведения четырех фермионных операторов A_i , можно представить в виде

$$\left[1 + (e^{-\beta(\varepsilon_k - \mu)})^{\pm 1} \right] \langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle_0 = \delta(1, 2) \langle A_3 A_4 \rangle_0 - \delta(1, 3) \langle A_1 A_3 \rangle_0 + \delta(1, 4) \langle A_2 A_3 \rangle_0.$$

С помощью (8.57) и (8.58) это выражение можно переписать следующим образом:

$$\langle A_1 A_2 A_3 A_4 \rangle_0 = \langle A_1 A_2 \rangle_0 \langle A_3 A_4 \rangle_0 - \langle A_1 A_3 \rangle_0 \langle A_2 A_4 \rangle_0 + \langle A_1 A_4 \rangle_0 \langle A_2 A_3 \rangle_0.$$

В общем случае получается формула (для фермионов)

$$\langle A_1 A_2 \dots A_{2n} \rangle_0 = \sum_p (-1)^p \langle A_{i_1} A_{i_2} \rangle_0 \langle A_{i_3} A_{i_4} \rangle_0 \dots \langle A_{i_{2n-1}} A_{i_{2n}} \rangle_0. \quad (8.59)$$

Здесь множители располагаются в порядке возрастания первых индексов $i_1 < i_2 < \dots < i_{2n-1}$. Если последовательность i_1, i_2, \dots, i_{2n} получается из исходной последовательности $1, 2, \dots, 2n$ с помощью четного числа перестановок, то число p четно, в противоположном случае оно нечетно. Другими словами, члены в правой части (8.59) имеют знак плюс или минус в зависимости от четности или нечетности перестановки. При выводе формулы (8.59) использованы следующие правила:

1. Рассматриваются все возможные комбинации спариваний операторов и по всем комбинациям производится суммирование.
2. Каждой такой комбинации приписывается знак в соответствии с четностью или нечетностью перестановок, которые необходимо сделать в исходном произведении, чтобы получить данную комбинацию.
3. В случае бозонов знак минус при перестановках отсутствует.

Среднее от парных произведений операторов рождения и уничтожения частиц по определению являются функциями Грина системы невзаимодействующих частиц, которые можно выразить через операторы Гейзенберга (8.47) [1], [12]:

$$\begin{aligned}
 G^+(\mathbf{r}_1, \beta_1; \mathbf{r}_2, \beta_2) &= \langle \Psi(\mathbf{r}_1, \beta_1) \bar{\Psi}^+(\mathbf{r}_2, \beta_2) \rangle_0 = \\
 &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - (\beta_1 - \beta_2)(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} (1 + \eta n_{\mathbf{k}}), \quad \beta_1 > \beta_2; \quad (8.60)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G^-(\mathbf{r}_2, \beta_2; \mathbf{r}_1, \beta_1) &= \pm \langle \bar{\Psi}^+(\mathbf{r}_2, \beta_2) \Psi(\mathbf{r}_1, \beta_1) \rangle_0 = \\
 &= \pm \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - (\beta_1 - \beta_2)(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} n_{\mathbf{k}}, \quad \beta_1 < \beta_2, \quad (8.61)
 \end{aligned}$$

здесь знаки "плюс" и "минус" относятся, соответственно, к случаям бозе- и ферми-частиц. Величина

$$n_{\mathbf{k}} = [e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - \eta]^{-1} \quad (8.62)$$

означает число заполнения в импульсном представлении. Последние равенства получены с помощью соотношения (8.58) для операторов Ψ и Ψ^+ . Функции G^+ и G^- называют соответственно запаздывающей и опережающей функциями Грина. Функцию (8.60) можно рассматривать как амплитуду вероятности процесса, при котором частица рождается в точке (\mathbf{r}_2, β_2) , затем, "охлаждаясь", распространяется до точки (\mathbf{r}_1, β_1) и уничтожается. Функция (8.61) является амплитудой вероятности процесса, который происходит с увеличением температуры. Такой процесс в квантовой теории рассматривается как распространение "дырки", т.е. из точки (\mathbf{r}_1, β_1) удаляется частица и возникает дырка, а затем это состояние распространяется до точки (\mathbf{r}_2, β_2) , где дырка уничтожается и появляется частица. При совпадающих обратных температурах $\beta_1 = \beta_2$ процесс описывается функцией (8.61). Используя теорему Вика (8.59) для гейзенберговских операторов $\Psi(\mathbf{r}, \beta)$, $\bar{\Psi}^+(\mathbf{r}, \beta)$, можно записать выражение (8.52) в терминах функций Грина (8.60) и (8.61). Дальнейший анализ этого выражения приобретает наглядность и существенно облегчает практические расчеты, если воспользоваться диаграммной техникой Фейнмана [24]. Введем графическое изображение для функций Грина (8.60) (8.61). Представим их в виде вертикальных линий и укажем стрелкой направление распространения дырки и частицы

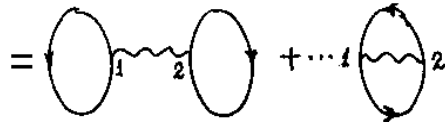
$$\begin{aligned}
 G^-(\vec{r}_1, \beta_1; \vec{r}_2, \beta_2) &= \begin{array}{c} \vec{r}_1, \beta_1 \\ \downarrow \\ \vec{r}_2, \beta_2 \end{array} \quad G^+(\vec{r}_1, \beta_1; \vec{r}_2, \beta_2) = \begin{array}{c} \vec{r}_1, \beta_1 \\ \uparrow \\ \vec{r}_2, \beta_2 \end{array} \quad (8.63)
 \end{aligned}$$

Волнистыми линиями с координатами на концах обозначим парные потенциалы взаимодействия (8.48). Из (8.52) следует, что графики для функций Грина образуют замкнутые линии (петли), а точки замыкания (узлы) содержат концы линий взаимодействия и каждому узлу приписываются свои координаты. В качестве примера рассмотрим первый член ряда теории возмущений

$$-C_1 = \int d1d1' \Phi(1, 1') \langle T[\bar{\Psi}^+(1)\bar{\Psi}^+(1')\Psi(1)\Psi(1')] \rangle_0. \quad (8.64)$$

Применяя теорему (8.59), будем иметь

$$\begin{aligned} -C_1 &= \int d1d2 \Phi(1, 2) \left\{ \langle \bar{\Psi}^+(1)\Psi(1) \rangle_0 \langle \bar{\Psi}^+(2)\Psi(2) \rangle_0 + \eta \langle \bar{\Psi}^+(1)\Psi(2) \rangle_0 \langle \bar{\Psi}^+(2)\Psi(1) \rangle_0 \right\} = \\ &= \int d1d2 \Phi(1, 2) \left\{ G^-(1; 1)G^-(2; 2) + \eta G^-(1; 2)G^-(2; 1) \right\} = \end{aligned} \quad (8.65)$$



Здесь используются обозначения (8.49) и введены функции Грина (8.61), описывающие распространение дырки. Интегралам от этих функций сопоставлены их графические изображения. Как видно, величина C_1 описывается двумя топологически различными диаграммами. Первая из них имеет аналог в классическом пределе и, следовательно, описывает прямое взаимодействие между частицами. Вторая диаграмма возникает только в квантовом случае и связана с обменными эффектами. Структура величин (8.52) с учетом (8.59) такова, что диаграммы могут быть разделены на две группы - связанных и несвязанных диаграмм. Если в диаграмме гриновские петли имеют хотя бы одну общую точку (узел) с потенциальными линиями, то такая диаграмма называется связанной. Анализ выражения (8.52) при $n \geq 2$ показывает, что оно распадается, в соответствии с теоремой Вика (8.59), на сумму произведений интегралов меньшей кратности. Каждый такой интеграл описывается определенной совокупностью связанных диаграмм, которые линейны по объему системы V [1]. С другой стороны очевидно, что произведениям интегралов соответствуют несвязанные диаграммы и они не обязаны быть пропорциональными объему. Последнее обстоятельство чрезвычайно затрудняет анализ ряда теории возмущений, поскольку его члены C_n могут содержать неверные зависимости от объема. Поэтому в теории систем многих частиц используется разложение по связанным диаграммам. Последнее получается, например, на основе известной теоремы из теории графов [160], которая формулируется следующим образом: если диаграммы топологически различны и вклад диаграммы, распадающейся на несвязанные части равен произведению каждой части, то для производящих функций несвязанных $F(x)$ и связанных $f(x)$ диаграмм справедливо соотношение

$$1 + F(x) = \exp[f(x)], \quad (8.66)$$

где x - некоторый параметр разложения. Чтобы удовлетворить условию этой теоремы, необходимо подсчитать число топологически одинаковых диаграмм, которые отличаются только нумерацией узлов. В n -ом члене ряда теории возмущений число

эквивалентных диаграмм равно $2^{n-1}(n-1)!$, поэтому, обозначая через \bar{C}_n n -ый член ряда, описываемый топологически различными диаграммами, запишем

$$C_n = 2^{n-1}(n-1)!\bar{C}_n.$$

Таким образом, если в (8.66) положить

$$F(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{C}_n}{2n} \text{ и } f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[C_n]_{\text{св}}}{2n},$$

где $[C_n]_{\text{св}}$ - обозначает связанные диаграммы, то выражение (8.56) с учетом указанных представлений можно записать в виде

$$-\beta\Delta\Omega = \ln \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{C}_n}{2n} \right] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{[C_n]_{\text{св}}}{2n}. \quad (8.67)$$

Для системы заряженных частиц параметром разложения x является квадрат заряда электрона e^2 . Для суммирования диаграмм множитель $1/n$ в (8.67) неудобен, поэтому он обычно устраняется с помощью дополнительного интегрирования по e^2 с учетом того, что $[C_n]_{\text{св}}$ пропорционально $(e^2)^n$, если потенциал взаимодействия кулоновский. В этом случае выражение (8.67) можно представить в виде

$$-\beta\Delta\Omega = \frac{1}{2} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \sum_{n=1}^{\infty} [C_n]_{\text{св}}. \quad (8.68)$$

Формула (8.68) является основной в квантовой термодинамике системы заряженных частиц. Именно на ее основе можно проводить конкретные расчеты термодинамических функций. Для практических расчетов удобно провести более детальный анализ связанных диаграмм. Рассмотрим топологически неэквивалентные связанные диаграммы с одинаковым количеством петель, линий взаимодействия, а также линий частиц и линий дырок. Введем для них обозначение $C_{2n-t,t}^{(n,m)}$, где n - число линий взаимодействия, m - число петель, t - число дырок и $2n-t$ - число линий частиц в диаграмме. Например, диаграммам в (8.65) соответствуют обозначения $C_{0,2}^{(1,2)}$ и $C_{0,2}^{(1,1)}$. Так как в связанных диаграммах $m \leq n+1$ и, кроме того, число линий дырок ограничивается условием $m \leq t \leq n+1$, то связанные диаграммы $[C_n]_{\text{св}}$ в (8.68) можно расположить в определенном порядке

$$[C_n]_{\text{св}} = \sum_{t=2}^{n+1} C_{2n-t,t}^{(n,1)} + \sum_{m=2}^{\infty} \sum_{t=m}^{n+m-1} C_{2(n+m-2)-t,t}^{(n+m-2,m)}. \quad (8.69)$$

Здесь выделена сумма обменных диаграмм с одной петлей $C_{2n-t,t}^{(n,1)}$. Смысл этого представления становится понятным, если рассмотреть последовательность величин $[C_1]_{\text{св}}$, $[C_2]_{\text{св}}, \dots$. Как видно,

$$[C_1]_{\text{св}} = C_{0,2}^{(1,1)} + \sum_{m=2}^{\infty} C_{m-2,m}^{(m-1,m)}$$

объединяет обменную диаграмму первого порядка (вторая диаграмма (8.65) и другие диаграммы с числом линий взаимодействия на единицу меньшим числа петель. Это

наименьшее число линий взаимодействия, которое позволяет образовать связанную диаграмму из данного числа петель. Диаграмма

$$C_{m-2, m}^{(m-1, m)} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (8.70)$$

в случае кулоновского потенциала пропорциональна параметру $e^{2(m-1)}$ и это есть низший порядок по e^2 из всех порядков, которые могут содержать связанные диаграммы, имеющие m петель. Здесь две внешние петли и верхние части внутренних петель соответствуют m функциям Грина (8.61); нижние части внутренних петель описывают $m - 2$ функций Грина (8.60) (распространение частиц). Эти диаграммы называются цепными. Если $[C_1]_{\text{св}}$ есть сумма членов ряда (8.69) низшего порядка по e^2 от каждой связанной группы петель, то член ряда (8.69)

$$[C_2]_{\text{св}} = C_{2,2}^{(2,1)} + C_{1,3}^{(2,1)} + \sum_{m=2}^{\infty} (C_{m,m}^{(m,m)} + C_{m-1,m+1}^{(m,m)}) \quad (8.71)$$

содержит следующий по сложности класс диаграмм, где порядок по e^2 на единицу больше. Первым двум членам в разложении (8.71) соответствуют топологически различные обменные диаграммы

$$C_{2,2}^{(2,4)} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (8.72)$$

В диаграмме $C_{m,m}^{(m,m)}$ число петель совпадает с аналогичным числом в диаграмме (8.70), но имеет на одну линию взаимодействия больше. Указанную диаграмму топологически можно образовать только одним способом - соединяя линией взаимодействия внешние петли в диаграмме (8.70). Эта диаграмма называется кольцевой и играет большую роль в термодинамике системы взаимодействующих заряженных частиц. Последнюю диаграмму $C_{m-1,m+1}^{(m,m)}$ в сумме (8.71) можно построить из цепной диаграммы (8.70), если дополнить ее линией взаимодействия, расположенной внутри какой-либо петли. Это единственная возможность образовать связанную диаграмму из m линий дырок и $m - 1$ линий частиц. Располагая линией взаимодействия поочередно в каждую петлю, получим сумму из m диаграмм. Если продолжить анализ членов ряда (8.69), то легко заметить, что диаграммы $C_{2n-t,t}^{(n,1)}$ и $C_{2(n+m-2)-t,t}^{(n+m-2,m)}$ можно построить путем последовательного добавления линий взаимодействия соответственно в петлю (8.65) и в цепную диаграмму (8.70) при соблюдении определенного соответствия между числом линий дырок и частиц. Из дальнейших рассмотрений будет видно, что такая структура ряда (8.69) позволяет последовательно учитывать вклады от взаимодействия в термодинамические функции системы заряженных частиц. Суммируем теперь общие правила построения диаграмм и написания соответствующих им интегралов.

1. Прежде всего следует изобразить все связанные топологически неэквивалентные диаграммы $C_{2n-t,t}^{(n,1)}$, $C_{2(n+m-2)-t,t}^{(n+m-2,m)}$, входящие в выражение (8.69).

2. Чтобы правильно определить количество линий частиц и дырок в связанной диаграмме, нужно установить в узлах определенный порядок расположения обратных температур $\beta > \beta_1 > \beta_2 > \dots > \beta_{n+m-2}$ и соответствующих им координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{n+m-2}$. Например, линии взаимодействия располагать одну над другой так, чтобы нумерация соответствующих узлов в диаграмме увеличивалась сверху вниз $1, 2, \dots, n + m - 2$ и нечетные номера стояли слева, а четные - справа. Выбрать направление обхода гриновских функций. Тогда все отрезки линий, заключенные между узлами, где направление обхода идет от меньшей обратной температуры к большей, будут линиями частиц и им нужно приписать функцию (8.60) и, наоборот, если обход совершается от большей обратной температуры к меньшей (или они одинаковы), то соответствующая линия будет дыркой и ей нужно сопоставить функцию (8.61).
3. Производится интегрирование по координатам каждого узла $i = (\mathbf{r}_i \beta_i)$, ($di = d^3 r_i d\beta_i$) и суммирование по спиновым переменным, если таковые рассматриваются. Интегрирование по β_i осуществляется в интервале $0 - \beta$.
4. В плазме содержится как минимум два сорта частиц - электроны и ионы. При использовании теоремы Вика спариваются частицы одного сорта, поэтому функции Грина в каждой петле диаграммы, описывающей распространение и уничтожение частицы, должны относиться к одному сорту частиц. В диаграммах каждой петле нужно приписать определенный сорт частицы, учесть все разные комбинации и просуммировать по всем сортам частиц.
5. Аналогично учитываются и спины частиц - в функциях Грина спины сохраняются, поэтому каждой сплошной линии в диаграмме нужно приписать свои спиновые координаты и произвести суммирование по ним. В результате возникает статистический вес частицы: $g_a = 2s_a + 1$, где s_a - спин частицы сорта a .
6. Результат умножается на $(-1)^n \eta^m g_a^m$, где n - число линий взаимодействия, m - число петель в диаграмме. Затем в соответствии с формулой (8.69) производится суммирование.

8.5 Фурье-преобразование функций Грина

Функции Грина (8.60) и (8.61) являются разрывными функциями переменной $\tau = \beta_1 - \beta_2$, испытывая при $\tau = 0$ скачок. Наличие разрыва существенно затрудняет вычисление интегралов при рассмотрении членов ряда (8.52). Технику вычислений можно значительно упростить, если ввести причинную функцию Грина, определенную на интервале $(-\beta, \beta)$ [1]:

$$G(\mathbf{r}, \tau) = \Theta(\tau)G^+(\mathbf{r}, \tau) + \Theta(-\tau)G^-(\mathbf{r}, \tau), \quad (8.73)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\Theta(\tau) = 1$ при $\tau > 0$ и $\Theta(\tau) = 0$ при $\tau < 0$. Очевидно, что $G(\mathbf{r}, \tau)$ при $\tau > 0$ описывает рождение частицы в точке \mathbf{r}_2, β_2 и ее уничтожение в точке \mathbf{r}_1, β_1 . Если $\tau < 0$, то функция $G(\mathbf{r}, \tau)$ описывает уничтожение частицы в точке \mathbf{r}_1, β_1 и рождение частицы в точке \mathbf{r}_2, β_2 . Преимущество введения функции (8.73) заключается в том,

что ее можно разложить в ряд Фурье по переменной τ

$$G(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-i\omega_n \tau} G(\mathbf{r}, \omega_n),$$

$$G(\mathbf{r}, \omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} e^{-i\omega_n \tau} G(\mathbf{r}, \tau) d\tau, \quad \omega_n = \frac{\pi}{\beta} n. \quad (8.74)$$

Коэффициенты Фурье, определяемые второй формулой (8.74), с помощью определения (8.73) можно представить в виде

$$G(\mathbf{r}, \omega_n) = \frac{1}{2} \left[\int_0^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G^+(\mathbf{r}, \tau) d\tau + \int_{-\beta}^0 e^{i\omega_n \tau} G^-(\mathbf{r}, \tau) d\tau \right]$$

Произведем замену переменной $\tau \rightarrow \tau + \beta$ во втором интеграле

$$(G\mathbf{r}, \omega_n) = \frac{1}{2} \left[\int_0^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G^+(\mathbf{r}, \tau) d\tau + \int_0^{\beta} e^{i\omega_n(\tau-\beta)} G^-(\mathbf{r}, \tau - \beta) d\tau \right]. \quad (8.75)$$

Рассматривая вторые выражения для функций Грина (8.60) и (8.61) и учитывая обозначение (8.62), легко показать, что

$$G^-(\mathbf{r}, \tau - \beta) = \eta G^+(\mathbf{r}, \tau). \quad (8.76)$$

Это соотношение можно доказать и на основе операторных определений этих функций, если воспользоваться циклической перестановкой операторов, аналогичной (8.54). Подставляя (8.76) во второй интеграл выражения (8.75), получим

$$G(\mathbf{r}, \omega_n) = \frac{1}{2} (1 + \eta e^{-i\omega_n \beta}) \int_0^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G^+(\mathbf{r}, \tau) d\tau.$$

Из рассмотрения множителя перед этим интегралом следует

$$\omega_n = \begin{cases} (2n+1)\pi/\beta & \text{для ферми-частиц} \\ 2n\pi/\beta & \text{для бозе-частиц} \end{cases} \quad (8.77)$$

и коэффициент Фурье всегда определяется выражением

$$G(\mathbf{r}, \omega_n) = \int_0^{\beta} e^{i\omega_n \tau} G^+(\mathbf{r}, \tau) d\tau. \quad (8.78)$$

Перейдем в выражениях (8.60), (8.61) к термодинамическому пределу $V \rightarrow \infty$. При этом суммы по \mathbf{k} заменяются на интегралы по правилу

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \dots \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k \dots$$

В результате для G^+ будем иметь разложение Фурье

$$G^+(\mathbf{r}, \tau) = -\frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{-\tau(\varepsilon_k - \mu)} (1 + \eta n_k), \quad (8.79)$$

где фурье-образ

$$G^+(\mathbf{k}, \tau) = -(1 + \eta n_k) e^{-\tau(\varepsilon_k - \mu)} \quad (8.80)$$

является функцией Грина в импульсном представлении. Подставим (8.79) в (8.78) и произведем элементарное интегрирование по τ . Учитывая затем выражения для частоты (8.77) и принимая во внимание определение (8.62), получим для коэффициента Фурье (8.78) следующее выражение

$$G(\mathbf{r}, \omega_n) = \int \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (8.81)$$

Здесь подинтегральную функцию

$$G(\mathbf{k}, \omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu} \quad (8.82)$$

можно считать функцией Грина в импульсном и частотном представлении. Через эту функцию можно выразить члены ряда теории возмущений (8.69) и построить соответствующую диаграммную технику, где переменными являются \mathbf{k} и ω_n [1]. Мы будем пользоваться диаграммной техникой в координатном пространстве, которая обсуждалась в предыдущем параграфе. При этом, однако, вместо двух функций (8.60) и (8.61) будем пользоваться причинной функцией Грина (8.74), где коэффициенты Фурье имеют вид (8.82), т.е.

$$G(\mathbf{r}, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega_n \tau)}}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (8.83)$$

Ниже будет видно, что использование этой функции существенно облегчает технику вычислений. В представлении (8.60) и (8.61) функции Грина, как уже отмечалось, имеют разрыв при $\beta_1 = \beta_2$. Действительно, переходя в этих выражениях от суммирования к интегрированию по \mathbf{k} и рассматривая их разность, при $\beta_1 = \beta_2$ будем иметь

$$G^+(\mathbf{r}_1, \beta_1, \mathbf{r}_2, \beta_1) - G^-(\mathbf{r}_1, \beta_1, \mathbf{r}_2, \beta_1) = -\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Это обстоятельство существенно затрудняет вычисление интегралов по переменным β_i при рассмотрении членов ряда (8.69). Дело в том, что при интегрировании необходимо выделять области, где функции G^+ и G^- непрерывны, но с ростом n порядка приближения число таких областей быстро растет. Использование функции (8.83) позволяет устранить эту проблему, поскольку указанная функция непрерывна во всей области интегрирования. Кроме того, интегрирование по β_i легко осуществляется, поскольку в (8.83) переменная τ входит только в показатель экспоненты. Правда, здесь возникает проблема суммирования по частотам, но, как будет видно в дальнейшем, она решается достаточно просто. Основные правила написания диаграмм и соответствующих им выражений были сформулированы в 8.4. Дополним их с учетом разложения (8.83):

- Интегрирование по координатам $di = d^3 r_i d\beta_i$ выполняется элементарно и приводит к результату $\delta(\sum_i \mathbf{k}_i) \delta(\sum_i \omega_i)$, где $\delta(\sum_i \mathbf{k}_i)$ является дельта-функцией, которая выражает закон сохранения импульса в каждом узле; $\delta(\sum_i \omega_i)$ - символ Кронекера, выражающий закон сохранения в узлах дискретной "частоты".
- по всем независимым импульсам и частотам диаграммы производится интегрирование и суммирование;

- результат умножается на $(-1)^n \eta_a^m g_a^m$ и производится суммирование по всем сортам частиц;
- не рассматриваются все связанные диаграммы, у которых имеется хотя бы одна петля с одним узлом. При суммировании по сортам частиц диаграммы, содержащие такие фрагменты, дают множитель, характеризующий электронейтральность плазмы

$$\sum_a n_a Z_a = 0 \quad (8.84)$$

или, что то же самое,

$$\sum_a Z_a \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = 0,$$

где n_a - концентрация частиц сорта a , Z_a - зарядовое число.

При вычислении вклада различных диаграмм в термодинамический потенциал возникает произведение функций Грина (8.74), где требуется выполнить суммирование по частотам (8.77). Такое суммирование может быть выполнено, если воспользоваться разложениями в ряд Фурье функций:

$$n_k e^{(\varepsilon_k - \mu)\tau} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu}, \quad (8.85)$$

$$(1 + \eta n_k) e^{-(\varepsilon_k - \mu)\tau} = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu}. \quad (8.86)$$

Формула (8.85) используется, если функция Грина описывает дырку, формула (8.86), если функция Грина соответствует частице. В качестве примера рассмотрим диаграммы (8.65). Если потенциал взаимодействия является кулоновским, то первая диаграмма из-за условия (8.84) дает нулевой вклад в термодинамический потенциал. Вторая диаграмма в соответствии с вышеприведенными правилами описывается выражением

$$C_{0,2}^{(1,1)} = \eta_a g_a \int d1 d2 \Phi_{aa}(12) G_a(12) G_a(21).$$

Подставим сюда потенциал (8.48), считая его кулоновским, а также функции Грина в виде (8.83) и введем явные обозначения для координат

$$\begin{aligned} C_{0,2}^{(1,1)} &= \eta_a g_a \int_0^\beta d\beta_1 \int_0^\beta \delta(\beta_1 - \beta_2) d\beta_2 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e_a^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \\ &\cdot \sum_{n_1, n_2} \int \frac{d^3 k_1 d^3 k_2}{(2\pi)^6 \beta^2} \frac{e^{i[\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) - \omega_{n_1}(\beta_1 - \beta_2)]}}{i\omega_{n_1} - \varepsilon_{k_1} + \mu} \cdot \frac{e^{i[\mathbf{k}_2 \cdot (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) - \omega_{n_2}(\beta_2 - \beta_1)]}}{i\omega_{n_2} - \varepsilon_{k_2} + \mu}. \end{aligned} \quad (8.87)$$

Здесь интегрирование по β_1 и β_2 легко выполняются. При интегрировании по пространственным координатам и импульсам удобно ввести новые переменные $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$, $\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2 = 2\mathbf{R}$, $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 2\mathbf{q}$. Кроме того, введем фурье-образ (8.44) кулоновского потенциала

$$u_{\mathbf{k}}^{ab} = \int d^3 r \frac{e_a e_b}{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{4\pi e_a e_b}{k^2} \quad (8.88)$$

Тогда выражение (8.87) преобразуется к следующему

$$C_{0,2}^{(1,1)} = \frac{\eta_a g_a 4\pi e_a^2 V}{(2\pi)^6 \beta} \int \frac{d^3 k d^3 q}{k^2} \sum_{n_1, n_2} \frac{e^{i\omega_{n_1} 0}}{i\omega_{n_1} - \varepsilon_{\mathbf{q}+\mathbf{k}/2} + \mu} \cdot \frac{e^{-i\omega_{n_2} 0}}{i\omega_{n_2} - \varepsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}/2} + \mu}. \quad (8.89)$$

Объем V в этом выражении возник при интегрировании по $d^3 r$, поскольку в термодинамике одно из интегрирований по координатному пространству нужно производить по конечному объему системы. Кроме того, здесь оставлены множители $\exp(\pm i\omega_n 0)$, чтобы подчеркнуть, что соответствующие функции Грина описывают дырки и возникают вследствие спаривания операторов $\Psi(\mathbf{r}, \beta)$ и $\bar{\Psi}^+(\mathbf{r}, \beta)$. Суммирование по n_1, n_2 осуществляется с помощью формулы (8.85) при $\tau = 0$. В результате будем иметь

$$\frac{1}{V} C_{0,2}^{(1,1)} = \frac{\eta_a g_a 4\pi e_a^2}{(2\pi)^6} \beta \int \frac{d^3 k}{k^2} d^3 q n_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2}}^a n_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2}}^a. \quad (8.90)$$

Введем новую величину - активность, деленную на длину волны де Бройля в кубе $\zeta_a = \lambda_a^{-3} e^{\beta\mu_a}$, где $\lambda_a = (2\pi\beta\hbar^2 m_a^{-1})^{1/2}$. Она удобна тем, что при переходе к классическому пределу при $\beta\mu_a \rightarrow -\infty$, когда функция распределения (8.62) переходит в больцмановскую

$$n_{\mathbf{k}}^a \rightarrow \exp \left\{ \beta \left(\mu_a - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_a} \right) \right\} = \zeta_a \lambda_a^3 \exp \left(-\frac{\beta\hbar^2 k^2}{2m_a} \right), \quad (8.91)$$

она стремится к плотности числа частиц идеального газа $\zeta_a \rightarrow N_a/V$. Если же в системе существенны квантовые эффекты, но активность $z_a = e^{\beta\mu_a} < 1$, то функцию распределения можно разложить в степенной ряд по z_a . Это дает возможность вычислять статистические интегралы типа (8.90) и получать явные значения вкладов от различных диаграмм в термодинамические функции. Используя такой подход вычислим интеграл (8.90). Для этого перемножим степенные ряды для двух функций распределения

$$n_{\mathbf{q}+\frac{\mathbf{k}}{2}}^a n_{\mathbf{q}-\frac{\mathbf{k}}{2}}^a = z_a^2 \sum_{s=0}^{\infty} (\eta_a z_a)^s \sum_{j=1}^{s+1} \exp \left\{ -\frac{\beta\hbar^2 (\mathbf{q} + \frac{\mathbf{k}}{2})^2}{2m_a} j - \frac{\beta\hbar^2 (\mathbf{q} - \frac{\mathbf{k}}{2})^2}{2m_a} (s+2-j) \right\}. \quad (8.92)$$

Если ограничиться первым членом этого ряда и подставить его в (8.90), то после интегрирования получим

$$\frac{C_{0,2}^{(1,1)}}{V} \simeq \frac{\eta_a g_a \zeta_a}{8\pi\beta} (\lambda_a \kappa_a)^2, \quad (8.93)$$

где $\kappa_a = (4\pi\beta e_a^2 \zeta_a)^{1/2}$ - обратный радиус частиц сорта a выраженный через активность ζ_a . Безразмерный параметр $\lambda_a \kappa_a$ является ответственным за влияние обменных эффектов на термодинамические функции плазмы.

Глава 9

Квантовая статистика и термодинамика плазмы

9.1 Эффективный потенциал. Кольцевые диаграммы

Сумма цепных диаграмм (8.70), как уже отмечалось, не дает вклада в термодинамический потенциал вследствие условия электронейтральности (8.84). Однако они являются составляющими частями более сложных диаграмм, которые играют важную роль в теории систем заряженных частиц. Рассмотрим указанные диаграммы, добавив к внешним петлям две линии взаимодействия

$$\begin{matrix} (m+1, m) \\ m, m \end{matrix} = \text{chain of rings} \quad (9.1)$$

В таком виде эти диаграммы (или их суммы по m) можно соединить с петлями других диаграмм и, таким образом, построить более сложные диаграммы. Запишем выражение для суммы диаграмм (9.1) и обобщим его на случай частиц разного сорта. При этом интегрирование произведем по всем координатам, за исключением координат свободных концов линий взаимодействия 1 и $2m + 2 = 2'$. Вначале запишем выражение для элемента, характеризующего частицу c -го сорта

$$= F_c(2i, 2i+2) = \int G^+(2i, 2i+1)G^-(2i+1, 2i)\Phi(2i+1, 2i+2)d(2i+1). \quad (9.2)$$

Из таких элементов легко построить диаграмму (9.1), если к узлу $2i$ присоединить линию взаимодействия предыдущего элемента, а к концу линии взаимодействия $2i+2$ узел последующего элемента. Таким образом, будем иметь

$$\begin{aligned} \Phi_{ab}^{\text{эфф.}}(1, 2') &= \Phi_{ab}(1, 2') + \sum_{m=1}^{\infty} \int d2 \dots d(2m)d3 \dots d(2m+1)C_{m,m}^{(m+1,m)} = \\ &= \Phi_{ab}(1, 2') + \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \int \Phi_{ab}(1, 2)\Pi_{i=1}^m \sum_c F_c(2i, 2i+2)d(2i). \end{aligned} \quad (9.3)$$

Здесь к сумме диаграмм (9.1) добавлен кулоновский потенциал $\Phi_{ab}(1, 2')$. Для системы заряженных частиц это выражение играет роль "эффективного потенциала". Диаграммную технику можно строить, фактически, как и прежде, используя вместо кулоновского эффективный потенциал. Займемся преобразованием выражения (9.3). Рассмотрим функцию (9.2). Подставляя в подинтегральное выражение функции Грина (8.60) и (8.61), а также используя фурье-представление кулоновского потенциала (8.44) в виде (8.48), после элементарного интегрирования по координатам $2i + 1 = \{\mathbf{r}_{2i+1}, \beta_{2i+1}\}$, получим

$$\sum_c F_c(2i, 2i + 2) = \sum_c \int \frac{d^3 k'_i}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e_c^2}{|\mathbf{k}'_i|^2} e^{i\mathbf{k}'_i \cdot (\mathbf{r}_{2i} - \mathbf{r}_{2i+2})} \Lambda_{\mathbf{k}'_i}^c(\beta_{2i} - \beta_{2i+2}), \quad (9.4)$$

где

$$\Lambda_{\mathbf{k}'_i}^c(\beta_{2i} - \beta_{2i+2}) = \int \frac{d^3 k''_i}{(2\pi)^3} \left(1 + \eta_c n_{\mathbf{k}'_i + \mathbf{k}''_i}^c\right) n_{\mathbf{k}''_i}^c e^{-(\beta_{2i} - \beta_{2i+2})(\varepsilon_{\mathbf{k}''_i} + \varepsilon_{\mathbf{k}'_i} - \varepsilon_{\mathbf{k}'_i + \mathbf{k}''_i})}. \quad (9.5)$$

Величину $\sum_c 4\pi e_c^2 \Lambda_{\mathbf{k}'_i}^c$, стоящую под знаком интеграла (9.4), разложим в ряд Фурье

$$\sum_c 4\pi e_c^2 \Lambda_{\mathbf{k}'_i}^c = \frac{1}{\beta} \sum_{n_i = -\infty}^{\infty} \Pi_{\mathbf{k}'_i}^{(n_i)} e^{\frac{2\pi i n_i}{\beta}(\beta_{2i} - \beta_{2i+2})}, \quad (9.6)$$

где

$$\Pi_{\mathbf{k}'_i}^{(n_i)} = \sum_c 4\pi e_c^2 \beta \int_0^1 d\tau \Lambda_{\mathbf{k}'_i}^c e^{-2\pi i n_i \tau}. \quad (9.7)$$

Учитывая (9.4) и представления (9.6) и (9.7), запишем

$$\sum_c F_c(2i, 2i + 2) = \sum_{n_i = -\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 k'_i}{(2\pi)^3} \frac{1}{|\mathbf{k}'_i|^2} \Pi_{\mathbf{k}'_i}^{(n_i)} e^{i\mathbf{k}'_i \cdot (\mathbf{r}_{2i} - \mathbf{r}_{2i+2}) + \frac{2\pi i n_i}{\beta}(\beta_{2i} - \beta_{2i+2})}. \quad (9.8)$$

Подставим этот результат в (9.3) и произведем интегрирование по координатам $\mathbf{r}_{2i}, \beta_{2i}$. При этом получается произведение дельта-функций и символов Кронекера

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} \delta(\mathbf{k}'_1 - \mathbf{k}) \delta(\mathbf{k}'_2 - \mathbf{k}'_1) \delta(\mathbf{k}'_3 - \mathbf{k}'_2) \dots \delta(\mathbf{k}'_m - \mathbf{k}'_{m-1}) e^{-i\mathbf{k}'_m \cdot \mathbf{r}'_2},$$

$$e^{\frac{2\pi i n_i \beta_1}{\beta}} \delta_{n_1, n} \delta_{n_2, n_1} \delta_{n_3, n_2} \dots \delta_{n_m, n_{m-1}} e^{-\frac{2\pi i n_m \beta'_2}{\beta}},$$

откуда

$$\mathbf{k}'_1 = \mathbf{k}'_2 = \mathbf{k}'_3 = \dots = \mathbf{k}'_m = \mathbf{k}$$

$$n_1 = n_2 = n_3 = \dots = n_m = n.$$

Первое из этих равенств выражает закон сохранения импульсов, второе - закон сохранения частот при взаимодействии между частицами. Используя указанные законы, будем иметь

$$\Phi_{ab}^{\Phi\Phi}(\mathbf{r}_1 \beta_1; \mathbf{r}_2 \beta_2) = \Phi_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) +$$

$$+ \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e_a e_b}{k^2} \left[\frac{\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}}{k^2} \right]^m \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{2\pi i n}{\beta}(\beta_1 - \beta_2) \right], \quad (9.9)$$

где принято $\mathbf{r}'_2 = \mathbf{r}_2$, $\beta'_2 = \beta_2$. Выражение (9.5) и коэффициент Фурье (9.7) с учетом законов сохранения и замены переменных $\mathbf{k}''_i = \mathbf{q}$, $\beta_{2i} - \beta_{2i+2} = \tau$ приобретают вид:

$$\Lambda_{\mathbf{k}}^c(\tau) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \left(1 + \eta_c n_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}^c\right) n_{\mathbf{q}}^c \exp \left\{ \frac{\beta \hbar^2}{2m_c} \tau \left[q^2 - (\mathbf{q} + \mathbf{k})^2 \right] \right\} \quad (9.10)$$

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)} = \sum_c 4\pi \beta e_c^2 \int_0^1 d\tau \Lambda_{\mathbf{k}}^c(\tau) e^{-2\pi i n \tau}. \quad (9.11)$$

Интеграл в (9.8) расходится при $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ (большие расстояния) из-за накопления числа множителей $1/k^2$. С другой стороны, сумма таких интегралов по m дает геометрическую прогрессию, которая является конечной величиной

$$\begin{aligned} \Phi_{ab}^{\Phi\Phi}(\mathbf{r}_1 \beta_1; \mathbf{r}_2 \beta_2) &= \Phi_{ab}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \\ &+ \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{4\pi e_a e_b}{k^2} \left[\frac{1}{1 + \Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}/k^2} - 1 \right] \exp \left[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \frac{2\pi i n}{\beta} (\beta_1 - \beta_2) \right]. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Формула справедлива как для фермионов, так и для бозонов. Величина $D_{\mathbf{k}}^{(n)} = 1 + \Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}/k^2$ является обобщенной диэлектрической проницаемостью. Подинтегральное выражение в (9.12) сложным образом зависит от величин \mathbf{k} и n и в общем интеграле вычислить нельзя. Однако, если $z < 1$, то можно получить разложение в виде степенного ряда по активности z , и, таким образом, упростить формулу (9.12). Такой подход был уже продемонстрирован при выводе приближенного выражения (8.93) на основе разложения (8.92). Принимая во внимание определение (9.12) и перемножая степенные ряды, получим

$$\begin{aligned} &\left(1 + \eta_c n_{\mathbf{q}+\mathbf{k}}^c\right) \exp \left\{ \frac{\beta \hbar^2}{2m_c} \tau \left[q^2 - (\mathbf{q} + \mathbf{k})^2 \right] \right\} = \\ &= z_c \sum_{s=0}^{\infty} (\eta_c z_c)^s \sum_{j=0}^s \exp \left\{ -\frac{\beta \hbar^2}{2m_c} \tau \left[(\mathbf{q} + \mathbf{k})^2 (j + \tau) + q^2 (s + 1 - j - \tau) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (9.13)$$

Используя это разложение, легко вычислить интеграл (9.10)

$$\Lambda_{\mathbf{k}}^c = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\eta_c z_c)^s}{(s+1)^{3/2}} \sum_{j=0}^s \exp \left\{ -\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m_c} \frac{(j+1)(s+1-j-\tau)}{s+1} \right\}.$$

Произведем здесь замену переменной $\tau \rightarrow \tau(s+1) - j$ и подставим результат в (9.11)

$$\begin{aligned} \Pi_{\mathbf{k}}^{(n)} &= \sum_c 4\pi \beta e_c^2 \zeta_c \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\eta_c z_c)^s}{\sqrt{s+1}} \sum_{j=0}^s \int_{\frac{j}{s+1}}^{\frac{s+1-j}{s+1}} \exp \left\{ -\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m_c} (s+1)\tau(1-\tau) - 2\pi i n (s+1)\tau \right\} d\tau = \\ &= \sum_c 4\pi \beta e_c^2 \zeta_c \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\eta_c z_c)^s}{\sqrt{s+1}} \int_0^1 \exp \left\{ -\frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m_c} (s+1)\tau(1-\tau) - 2\pi i n (s+1)\tau \right\} d\tau. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Величина (9.14) имеет более простой вид, чем (9.11), но и в этом случае найти значение эффективного потенциала (9.12) в явном виде не представляется возможным. Это можно сделать в двух предельных случаях. При высоких температурах параметр

взаимодействия $\beta e^2 n^{1/3}$ (см. 8.1) мал и система заряженных частиц является разреженным классическим газом. Взаимодействие в такой системе из-за дальнегодействующего характера кулоновского потенциала распространяется на большие расстояния и охватывает много частиц. Большим расстояниям соответствуют малые импульсы, поэтому учет взаимодействий можно осуществить, рассматривая предел величины $\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}$ при малых значениях импульса. При низких температурах малым параметром взаимодействия является $Ze^2(Zn)^{1/3}(E_F)^{-1}$. Для электронов этот параметр можно представить в виде $4\pi\beta e^2 n_e^{1/3}(n_e\lambda_e^3)^{-2/3}$, откуда видно, что в квантовом газе взаимодействие мало из-за высокой плотности, что характерно при сильном вырождении, когда параметр вырождения $n_e\lambda_e^3$ гораздо больше температурного параметра $\beta e^2 n^{1/3}$. В этом случае наибольший вклад во взаимодействия между заряженными частицами опять дают малые передачи импульсов. В обоих случаях параметры взаимодействия пропорциональны e^2 , поэтому эту величину можно рассматривать как размерный параметр малости и пользоваться теорией возмущений. Отметим, что в последнем случае разложения (8.92), (9.13) и формула (9.14) не применимы и при определении предельного выражения для $\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}$ при малых \mathbf{k} нужно исходить из начальных формул (9.10) и (9.11). В случае высоких температур и малых импульсов передачи разложение экспоненты в (9.11) по степеням k^2 приводит к приближенным формулам для $n = 0$ и $n \geq 1$

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{(0)} \simeq \sum_c 4\pi\beta e_c^2 \zeta_c \left(1 - \frac{1}{6} \frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m_c} \right) \simeq \kappa^2 - \frac{k^2}{24\pi} (\lambda_e \kappa_e)^2, \quad (9.15)$$

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)} \simeq \sum_c 4\pi\beta e_c^2 \zeta_c \frac{\beta \hbar^2 k^2}{2m_c} \cdot \frac{1}{4\pi^2 n^2} \simeq \frac{k^2}{2 \cdot (4\pi)^3 n^2} (\lambda_e \kappa_e)^2. \quad (9.16)$$

Здесь введены обозначения

$$\kappa^2 = \sum_c 4\pi\beta e_c^2 \zeta_c, \quad \kappa_e^2 = 4\pi\beta e_e^2 \zeta_e, \quad (9.17)$$

которые соответствуют обратным радиусам экранирования Дебая в большом ансамбле для всех сортов частиц и электронов. Введем также аналогичное обозначение для ионов

$$\kappa_i^2 = \sum_c 4\pi\beta e_c^2 \zeta_c, \quad (9.18)$$

где суммирование производится только по сортам ионов. При выводе формул (9.15) и (9.16) учитывался только первый член ряда (9.14). Кроме того, приближенные равенства получены в предположении, что ионы являются классическими частицами, поскольку длины волн де Бройля для ионов λ_i гораздо меньше соответствующей длины λ_e для электронов. Таким образом, формулы (9.15) и (9.16) учитывают вклад квантовых эффектов от электронов с точностью до значений параметра $(\lambda_e \kappa_e)^2$ включительно. Используя эти формулы, можно вычислить интеграл в (9.12). Для этого из суммы по n нужно выделить член с $n = 0$ и рассмотреть его отдельно от остальной суммы. После простых преобразований и интегрирования по угловым сферическим координатам получаются следующие выражения

$$\Phi_{ab}^{\text{эфф}}(\mathbf{r}_1, \beta_1; \mathbf{r}_2, \beta_2) = \frac{2e_a e_b \gamma^2}{\pi |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \int_0^\infty \frac{dk \cdot k \cdot \sin k |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}{k^2 + \gamma^2 \kappa^2} - \frac{4e_a e_b}{\pi |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{(\lambda_e \kappa)^2}{(2\pi)^3}.$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos[2\pi n(\beta_1 - \beta_2)/\beta]}{n^2 + (\lambda_e \kappa_e)^2/16\pi^3} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k} \sin k|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \frac{e_a e_b \gamma^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\kappa\gamma|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e_a e_b}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \frac{(\kappa_e \lambda_e)^2}{(2\pi)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos[2\pi n(\beta_1 - \beta_2)/\beta]}{n^2 + (\lambda_e \kappa_e)^2/16\pi^3}, \quad (9.19)$$

где

$$\gamma = \left[1 - \frac{(\lambda_e \kappa_e)^2}{24\pi} \right]^{-1/2}.$$

Первый член этой формулы является потенциалом Дебая с квантовой поправкой $(\lambda_e \kappa_e)^2$ -второй имеет квантовое происхождение и зависит от разности обратных температур $\beta_1 - \beta_2$ при распространении частицы из точки \mathbf{r}_1 в точку \mathbf{r}_2 . Характерно, что зависимость от координат здесь кулоновская. Физически это означает, что в квантовой области расстояний на распространение частиц (ее охлаждение или нагревание) экранирование не влияет. Таким образом, в приближении малых импульсов, когда можно пренебречь членами порядка $(\lambda_e \kappa_e)^2$, эффективный потенциал является дебаевским

$$\Phi_{ab}^D(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \frac{e_a e_b}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\kappa|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (9.20)$$

С помощью эффективного потенциала (9.12) легко найти выражение для суммы кольцевых диаграмм. Для этого модифицируем элемент (9.2), заменяя в нем кулоновскую линию взаимодействия на эффективный потенциал, который будем изображать пунктирной линией

$$\Phi_{ab}^{\text{эфф.}}(1, 2) = (1 - \text{---} - \text{---} - 2). \quad (9.21)$$

После такой замены замкнем свободный конец линии взаимодействия $2i+2$ на узел $2i$ и для удобства переобозначим координаты узлов $2i+1 = 1$, $2i+2 = 2$. В результате получим сумму

$$C_{0,2}^{(1,1)} + \sum_{m=2}^{\infty} C_{m,m}^{(m,m)},$$

состоящую из известной нам диаграммы (8.65) (вторая диаграмма) и суммы кольцевых диаграмм. Если использовать формулы (9.8) и (9.9) (без кулоновского потенциала, который входит в диаграмму $C_{0,2}^{(1,1)}$), получим

$$\sum_{m=2}^{\infty} C_{m,m}^{(m,m)} = \sum_{m=2}^{\infty} (-1)^m \sum_c \int F_c(1, 2) d1 d2 = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 k}{1 + \Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}/k^2} \left(\frac{\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}}{k^2} \right)^2. \quad (9.22)$$

Суммирование начинается с $m = 2$, поскольку диаграмма с двумя петлями и одной линией взаимодействия равна нулю из-за условия электронейтральности (8.84). Вклад в термодинамический потенциал от кольцевых диаграмм получается после интегрирования по заряду выражения (9.22) в соответствии с формулой (8.68) [23]

$$-\frac{\beta \Delta \Omega^k}{V} = \beta \Delta p^k = \frac{1}{2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[\frac{\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}}{k^2} - \ln \left(1 + \frac{\Pi_{\mathbf{k}}^{(n)}}{k^2} \right) \right]. \quad (9.23)$$

Это выражение можно применять как для фермионов, так и бозонов. В теории Дебая-Хюккеля оно приводит к формуле (9.32), а при низких температурах ($\beta \rightarrow \infty$) к

формуле Гелл-Манна и Бракнера для корреляционной энергии электронного газа [4]. Хотя, как теория Дебая-Хюккеля, так и теория Гелл-Манна и Бракнера, получены на основе теории возмущений, где параметром разложения является e^2 , первая из них описывает предельный случай малой плотности газа, а вторая - случай больших плотностей. Это объясняется тем, что в классическом случае безразмерным параметром является $\beta e^2 n^{1/3}$, с другой стороны при ($\beta \rightarrow \infty$), безразмерным параметром (см.8.1) является $m_e e^2 / \hbar^2 n^{1/3}$. Поэтому в классическом случае всякое разложение по степеням e^2 есть одновременно разложение по степеням плотности (или по степеням активности в большом каноническом ансамбле), пригодное при малых значениях последней. С другой стороны, при низких температурах разложение по степеням e^2 есть одновременно разложение по степеням обратной плотности, пригодное при больших плотностях. Оба эти результата следуют из формулы (9.23). Кольцевые диаграммы составляют первую часть суммы (8.71); второй член нужно опустить, поскольку диаграммы $C_{m-1, m+1}^{(m, m)}$ содержат одну или две петли, связанных лишь одной линией взаимодействия. Первые два члена описывают обменные эффекты и в общем случае их следует учитывать. Выражение для обменной диаграммы (первая диаграмма (8.72) записывается в соответствии с общими правилами

$$C_{2,2}^{(1,2)} = \eta_a g_a \int \Phi_{aa}(1, 2) \Phi_{aa}(3, 4) G(1, 3) G(2, 4) G(4, 1) G(3, 2) d1 d2 d3 d4.$$

После подстановки функций (8.83) и Фурье-представлений потенциалов (8.88) в форме (8.48), можно выполнить интегрирование по пространственным и температурным координатам, принимая во внимание обозначения (8.49). При этом получаются четыре δ -функции от импульсов и один символ Кронекера от частот, что является следствием законов сохранения импульсов и частот в узлах диаграммы. Затем производится три элементарных интегрирований по импульсам и одно суммирование по частотам. Один из законов сохранения импульсов выполняется тождественно. Это приводит к появлению множителя $\delta(\mathbf{k} = 0)$, пропорционального объему системы

$$\delta(\mathbf{k} = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})_{\mathbf{k}=0} d^3 r = \frac{V}{(2\pi)^3}.$$

В результате получается выражение

$$C_{2,2}^{(2,1)} = -\frac{g_a \eta_a V}{(2\pi)^9 \beta^2} \sum_{n_1, n_2, m} \int d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 q \frac{u_{\mathbf{q}}^a u_{\mathbf{q}+\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}^a}{(i\omega_{n_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_1} + \mu_a)(i\omega_{n_2} + i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q}} + \mu_a)} \cdot \frac{1}{(i\omega_{n_2} - i\omega_m - \varepsilon_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q}} + \mu_a)(i\omega_{n_1} - \varepsilon_{\mathbf{k}_2} + \mu_a)}.$$

После суммирования по частотам (с помощью формул (8.85), (8.86)), будем иметь

$$\frac{1}{V} C_{2,2}^{(2,1)} = \frac{g_a \eta_a m_a \beta}{(2\pi)^9} \int \frac{d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 q}{\hbar^2(\mathbf{k}, \mathbf{q})} u_{\mathbf{k}_1}^a u_{\mathbf{q}}^a \left[n_{\mathbf{k}_2 - \frac{\mathbf{k}_1}{2} + \frac{\mathbf{q}}{2}}^a n_{\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{k}_1}{2} + \frac{\mathbf{q}}{2}}^a - n_{\mathbf{k}_2 - \frac{\mathbf{k}_1}{2} - \frac{\mathbf{q}}{2}}^a n_{\mathbf{k}_2 + \frac{\mathbf{k}_1}{2} - \frac{\mathbf{q}}{2}}^a \right]. \quad (9.24)$$

Для второй диаграммы запишем окончательный результат

$$\frac{1}{V} C_{1,3}^{(2,1)} = \frac{\eta_a g_a \beta^2}{(2\pi)^9} \int d^3 k_1 d^3 k_2 d^3 q u_{\mathbf{q}}^a u_{\mathbf{q}+\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2}^a n_{\mathbf{k}_1}^a n_{\mathbf{k}_2}^a n_{\mathbf{q}+\mathbf{k}_1}^a \left(1 + \eta_a n_{\mathbf{q}+\mathbf{k}_1}^a \right). \quad (9.25)$$

Вычислим приближенно вклады в термодинамический потенциал от выражений (9.22), (9.24) и (9.25), полагая, что обменные эффекты порядка $(\lambda_e \kappa)^2$ малы и ими можно пренебречь. Например, при достаточно высокой плотности заряженных частиц $\sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и, сравнительно, низкой температуре $\sim 10000 \text{ K}$ имеем $(\lambda_e \kappa)^2 \simeq 0,073$. При указанном предположении в формуле (9.22) достаточно учесть член суммы при $n = 0$. Остальной суммой, как это следует из (9.19), можно пренебречь. Кроме того, в разложении (9.14) нужно ограничиться первым членом суммы по s :

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{(0)} \simeq \sum_c 4\pi \beta e_c^2 \zeta_c w_c(k),$$

где введено обозначение

$$w_c(k) = \int_0^1 d\tau \exp \left[-\frac{k^2}{4\pi} \lambda_c^2 \tau(1-\tau) \right]. \quad (9.26)$$

Если ионы считать классическими частицами, то

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{(0)} \simeq \kappa_i^2 + \kappa_e^2 w_e,$$

где κ_i^2 и κ_e^2 определяются формулами (9.17) и (9.18). Учитывая, что в интеграл (9.22) основной вклад дают малые импульсы, введем малую величину $\Delta w_e = w_e - 1$ и запишем

$$\Pi_{\mathbf{k}}^{(0)} \simeq \kappa^2 + \kappa_e^2 \Delta w_e$$

Подставим это выражение в формулу (9.22) при $n = 0$ и разложим подинтегральное выражение в ряд по величине Δw_e . С точностью до членов $\sim (\Delta w_e)^2$ включительно будем иметь

$$\frac{1}{V} \sum_{m=2}^{\infty} C_{m,m}^{(m,m)} \simeq \frac{2\kappa^4}{(2\pi)^2} \left[I_0^{(1)} + 2\nu_e I_1^{(1)} - \kappa_e^2 I_1^{(2)} + \kappa_e^4 I_2^{(3)} - 2\kappa_e^2 \nu_e I_2^{(2)} + \nu_e^2 I_2^{(1)} \right], \quad (9.27)$$

где $\nu_e = \kappa_e^2 / (\kappa_e^2 + \kappa_i^2)$,

$$I_0^{(1)} = \int_0^{\infty} \frac{dk}{k^2 + \kappa^2}, \quad I_1^{(1)} = \int_0^{\infty} \frac{dk \Delta w_e}{k^2 + \kappa^2}, \quad I_1^{(2)} = \int_0^{\infty} \frac{dk \Delta w_e}{(k^2 + \kappa^2)^2},$$

$$I_2^{(3)} = \int_0^{\infty} \frac{dk (\Delta w_e)^2}{(k^2 + \kappa^2)^3}, \quad I_2^{(2)} = \int_0^{\infty} \frac{dk (\Delta w_e)^2}{(k^2 + \kappa^2)^2}, \quad I_2^{(1)} = \int_0^{\infty} \frac{dk (\Delta w_e)^2}{k^2 + \kappa^2},$$

Интеграл $I_0^{(1)}$ равен $\pi/2\kappa$ и описывает классическую дебаевскую поправку. Все остальные интегралы учитывают квантовые эффекты и стремятся к нулю при $\lambda_e \kappa \rightarrow 0$. $I_1^{(1)}$, $I_2^{(1)}$ выражаются через функции вероятностей, $I_1^{(2)}$, $I_2^{(2)}$, $I_2^{(3)}$ - через гипергеометрические функции. Рассмотрим интеграл $I_1^{(1)}$. Учитывая, что $\Delta w_e = w_e - 1$ и w_e определяется формулой (9.26), запишем

$$I_1^{(1)} = I_0^{(1)} + \int_0^1 d\tau \int_0^{\infty} \frac{dk}{k^2 + \kappa^2} \exp \left[-\frac{\lambda_e^2}{4\pi} k^2 \tau(1-\tau) \right] =$$

$$= -\frac{\pi}{2\kappa} + \frac{\pi}{2\kappa} \int_0^1 d\tau \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left[\frac{\lambda_e \kappa}{2\sqrt{\pi}} \sqrt{\tau(1-\tau)} \right] \right\} \exp \left[\frac{\kappa^2 \lambda_e^2}{4\pi} \tau(1-\tau) \right],$$

где $erf(z)$ - интеграл вероятностей. Производя здесь разложение функций в ряд Тейлора с точностью до первой степени параметра $\lambda_e \kappa$ включительно, находим

$$I_1^{(1)} \simeq -\frac{\pi \lambda_e}{16}.$$

Аналогичным путем вычисляется интеграл

$$I_2^{(1)} \simeq \frac{\pi \lambda_e}{8} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right)$$

Интегралы $I_1^{(2)}, I_2^{(2)}, I_2^{(3)}$ порядка $(\lambda_e \kappa)^2$ и мы их рассматривать не будем. В результате выражение (9.27) приобретает вид

$$\frac{1}{V} \sum_{m=2}^{\infty} C_{m,m}^{(m,m)} \simeq \frac{\kappa^3}{4\pi} \left[1 - \frac{\lambda_e \kappa}{4} \nu_e (1 - \nu_e) - \frac{\lambda_e \kappa}{4\sqrt{2}} \nu_e^2 \right]. \quad (9.28)$$

Чтобы определить полный вклад в термодинамический потенциал от второго члена (8.71) ряда (8.69), нужно вычислить интегралы (9.24) и (9.25), которым соответствуют диаграммы (8.72). При этом возникают интегралы гауссовского типа, которые вычисляются в терминах элементарных функций и функций $erf(z)$. Ограничиваясь первыми членами разложений по параметру $\lambda_e \kappa$, будем иметь для электронов

$$\frac{1}{V} C_{2,2}^{(2,1)} \simeq -\frac{\ln 2 \kappa^3}{16\pi\sqrt{2}} \nu_e^2 \lambda_e \kappa, \quad \frac{1}{V} C_{2,2}^{(2,2)} \simeq -\frac{1}{6\sqrt{6}\pi^2} \zeta_e (\lambda_e \kappa_e)^4. \quad (9.29)$$

Как видно, в пределах сделанных допущений следует сохранить вклад от первой диаграммы (8.72) и не учитывать от второй. Суммируя формулы (9.28) и (9.29), получим

$$[C_2]_{\text{св.}} \simeq \left[1 - \frac{\lambda_e \kappa}{4} \nu_e (1 - \nu_e) - \frac{\lambda_e \kappa}{4} \nu_e^2 \frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}} \right] \quad (9.30)$$

Подставляя (9.30) в формулу (8.68) и выполняя интегрирование по e^2 , получим вклад в термодинамический потенциал от кольцевых и обменных диаграмм

$$\frac{-\beta \Delta \Omega^k}{V} = \frac{\kappa^3}{12\pi} \left[1 - \frac{3}{16} \lambda_e \kappa \nu_e (1 - \nu_e) - \frac{3}{16} \frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}} \lambda_e \kappa \nu_e^2 \right]. \quad (9.31)$$

Множитель перед скобкой является известной классической поправкой Дебая-Хюккеля в большом каноническом ансамбле. Запишем эту поправку в виде

$$\frac{\kappa^3}{12\pi} = \frac{\Gamma}{3} \sum_c Z_c^2 \zeta_c, \quad (9.32)$$

где

$$\Gamma = \beta e^2 \kappa \quad (9.33)$$

является параметром взаимодействия, представляющим собой отношение кулоновской амплитуды рассеяния βe^2 к дебаевскому радиусу $r_D = 1/\kappa$. Приведем также формулу для термодинамического потенциала (давления) идеального газа

$$-\frac{\beta \Omega_0}{V} = \beta p_0 = \sum_c \zeta_c. \quad (9.34)$$

Учитывая (9.32) и (9.33), составим отношение выражений (9.31) и (9.34)

$$\frac{\Delta\Omega^k}{\Omega_0} = \frac{\Delta p^k}{p_0} = \frac{\sum_c Z_c^2 \zeta_c \Gamma}{\sum_c \zeta_c} \frac{1}{3} \left[1 - \frac{3}{16} (1 - \nu_e) \nu_e \lambda_e \kappa - \frac{3}{16} \frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}} \nu_e^2 \lambda_e \kappa \right]. \quad (9.35)$$

Как видно, поправка к давлению от кольцевых диаграмм по отношению к давлению идеального газа пропорциональна классическому параметру Γ и квантовому параметру $\lambda_e \kappa$. Если $\lambda_e \kappa \ll 1$, то получается известное приближение Дебая-Хюккеля

$$\frac{\Delta\Omega^D}{\Omega_0} = \frac{\Delta p^D}{p_0} = \frac{\sum_c Z_c^2 \zeta_c}{\sum_c \zeta_c} \cdot \frac{\Gamma}{3}. \quad (9.36)$$

9.2 Связанные состояния. Лестничные диаграммы

В предыдущем параграфе обсуждался характер расходимостей статистических интегралов на больших расстояниях, связанных с дальнедействующим кулоновским потенциалом. Было показано, что проблема решается с помощью эффективного потенциала. Это позволило получить конечное выражение для термодинамического потенциала в кольцевом приближении (9.23). Однако при сравнительно невысоких температурах ($T \sim 10^3 \div 10^5$ K) большую роль могут играть малые расстояния, при которых прямое взаимодействие между ионами и электронами происходит по квантовым законам. Иными словами, речь идет о частично ионизованной плазме, где вклады в термодинамические функции дают как свободные, так и связанные состояния электронов и ионов. Характерным энергетическим параметром определяющим наличие связанных состояний является атомная единица энергии или ее половинная величина - Ридберг

$$Ry = m_e e^4 / 2\hbar^2 = 1.5 \cdot 10^5 \text{ } ^\circ K = 13,6 \text{ эВ}$$

равная потенциалу ионизации атома водорода. Если параметры плазмы Γ и $\lambda_e \kappa$ считать независимыми, то Ry будет функцией от них

$$\beta Ry = \pi \left(\frac{\Gamma}{\lambda_e \kappa} \right)^2 = \pi \left(\frac{\beta e^2}{\lambda_e} \right)^2. \quad (9.37)$$

Если $\beta Ry \geq 1$, то с увеличением плотности плазмы сначала достигаются условия, когда $\Gamma \sim 1$, потом $\lambda_e \kappa \sim 1$ и затем уже электроны вырождаются. В соответствии с этой последовательностью можно рассматривать термодинамику слабонеидеальной, сильнеидеальной невырожденной и затем вырожденной плазмы. При этом, если энергия связанного состояния электрона и иона $e^2 \lambda_e^{-1}$ превышает энергию теплового движения, то связанные состояния могут давать большой вклад в термодинамические функции. При такой ситуации последовательный подход к определению термодинамических функций плазмы основан на физической модели, где рассматриваются ядра и электроны, а кулоновское взаимодействие между ними учитывается на основе квантостатистической теории [5], [14], [29]. Учет связанных и свободных состояний частиц является сложной задачей. Трудности заключаются в необходимости правильно учитывать взаимодействия между заряженными частицами как на больших, так и на малых расстояниях. Иными словами, теоретический аппарат должен содержать уравнения, которые описывают состояния частиц с отрицательными и положительными энергиями. Наиболее просто такую задачу можно сформулировать для

плазмы водорода, где присутствуют частицы двух сортов - протоны и электроны. В 9.1 было показано, что для получения конечных выражений для термодинамических функций, нужно перегруппировать ряд теории возмущений так, чтобы в коэффициенты (8.69) входили суммы диаграмм, которые в отдельности дают расходимости статистических интегралов на больших расстояниях, но в сумме являются конечными величинами. На малых расстояниях возникает такая же проблема. Например, при попытке вычислить коэффициент $[C_3]_{\text{св}}$ сумма диаграмм логарифмически расходится при $\mathbf{r} \rightarrow 0$ и далее, при $n > 3$, расходимости увеличиваются как r^{-n+3} . Таким образом, вновь возникает проблема отбора и суммирования расходящихся диаграмм, но уже на малых расстояниях. Рассмотрим третий коэффициент ряда (8.69):

$$[C_3]_{\text{св}} = C_{4,2}^{(3,1)} + C_{3,3}^{(3,1)} + C_{2,4}^{(3,1)} + \sum_{m=2}^{\infty} [C_{m+2,m}^{(m+1,m)} + C_{m+1,m+1}^{(m+1,m)} + C_{m,m+2}^{(m+1,m)}]. \quad (9.38)$$

Первые три члена описывают обменные эффекты и имеют по квантовому параметру порядок больший, чем $(\lambda_e \kappa)^2$. Для оценки членов ряда под знаком суммы заметим, что функции Грина (8.60) и (8.61) пропорциональны соответственно величинам $1 + \eta n_k$ и n_k . Если ограничиться случаем $z = \exp(\beta\mu) \ll 1$, то можно положить $1 + \eta n_k \sim 1$, а n_k считать бoльцмановской функцией распределения (8.91) (или пользоваться разложениями типа (8.92), (9.13), если возникает необходимость учитывать квантовые эффекты определенных порядков). Нетрудно заметить при этом, что наибольший вклад в термодинамические функции будут давать диаграммы, где наибольшее число линий частиц. Из трех членов суммы (9.20) такими диаграммами являются $C_{m+2,m}^{(m+1,m)}$. В дальнейшем ограничимся рассмотрением этих диаграмм. Кроме того, будем считать квантовые эффекты порядка $(\lambda_e \kappa)^2$ и выше пренебрежимо малыми, что позволит использовать наиболее простую форму эффективного потенциала (9.20). Чтобы изобразить в компактном виде диаграммы, соответствующие коэффициентам $C_{m+2,m}^{(m+1,m)}$, введем для цепных элементов (9.1), входящих в эти диаграммы, обозначения

$$\underline{m}_i \quad (9.39)$$

где m_i - число, указывающее сколько петель содержится в i -ой цепи и одновременно определяющее число линий взаимодействия $m_i + 1$, линий частиц m_i и линий дырок m_i . Заметим, что при $m_i = 0$ цепная линия (9.39) превращается в кулоновский потенциал

$$\underline{m}_i = 0$$

Коэффициенты $C_{m+2,m}^{(m+1,m)}$ определяются двумя топологически различными диаграммами, которые с помощью (9.39) можно изобразить следующим образом

$$C_{m+2,m}^{(m+1,m)} = \sum_{\sum_{i=1}^3 m_i = m-2} \text{Diagram 1} + \sum_{\sum_{i=1}^4 m_i = m-3} \text{Diagram 2} \quad (9.40)$$

Отметим, что при $m = 2$ имеется только одна (первая) диаграмма с двумя петлями и тремя кулоновскими линиями взаимодействия. Выражение для суммы диаграмм

(9.40) имеет вид

$$[C_3]_{\text{св}} \approx \sum_{m=2}^{\infty} C_{m+2,m}^{m+1,m} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (9.41)$$

где после суммирования по m_i и по всем сортам частиц с применением всех операций, проделанных при вычислении эффективного потенциала (9.12), учтен конечный результат

$$\sum_c \sum_{m_i=0}^{\infty} \binom{m_i}{c} = 1 - \dots - 2 \simeq \Phi_{ab}^{\ominus\Phi\Phi}(1, 2).$$

Рассмотрим теперь весь ряд теории возмущений в выражении для термодинамического потенциала (8.68). В n -ом члене этого ряда (8.69) учтем, принимая во внимание принятые выше приближения, только коэффициенты с наибольшим числом линий частиц ($t = m$). Тогда

$$\sum_{n=2}^{\infty} [C_n]_{\text{св}} \simeq \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{m=2}^{\infty} C_{2n+m-4,m}^{(n+m-2,m)} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} \quad (9.42)$$

Первая сумма диаграмм (суммирование ведется по числу линий эффективных потенциалов) называется "лестничной" и играет главную роль в теории плазмы. Дело в том, что такие диаграммы дают наибольшие расходимости на малых расстояниях по сравнению с любой другой, имеющей столько же линий взаимодействия. Интеграл от первой диаграммы ($n = 2$) соответствует кольцевому приближению (9.23) и в классическом пределе сводится к формуле Дебая-Хюккеля (9.36), которая дает вклад в термодинамический потенциал пропорциональный $\zeta^{3/2}$. Интеграл от диаграммы при $n = 3$ логарифмически расходится при $r \rightarrow 0$, а при $n > 3$ остальные интегралы расходятся по закону r^{-n+3} . Первая диаграмма во второй сумме ($n = 4$) дает конечный вклад в термодинамический потенциал пропорциональный ζ^2 . Интегралы от следующих диаграмм расходятся также как и лестничные интегралы при $n \geq 3$. Рассмотрим в (9.42) сумму лестничных диаграмм, представив ее в другой форме - разомкнув петли в узлах 1,2 и исключив верхнюю линию взаимодействия. Разомкнутым концам припишем координаты 1,2 и 1',2':

$$G_2(1, 2; 1', 2') = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \dots + (-1)^n \text{diagram n} \quad (9.43)$$

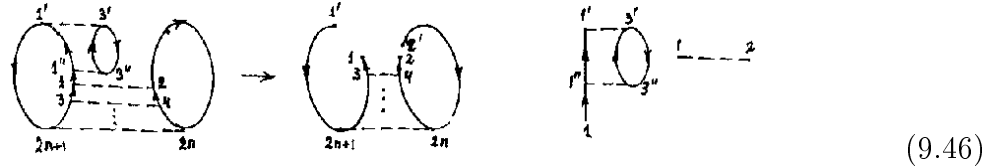
Сумма диаграмм (9.43), как легко проверить последовательными итерациями, удовлетворяет интегральному уравнению

$$G_2(1, 2; 1', 2') = G^-(1, 1')G^-(2, 2') - \int G^+(1, 3)G^+(2, 4)\Phi(34)G_2(34; 1', 2')d3d4. \quad (9.44)$$

Как видно, в этом уравнении одночастичные функции Грина входят в виде парных произведений опережающих и запаздывающих функций. Это отражает тот факт, что рассматриваемая двухчастичная задача описывает распространение каждой частицы между двумя пространственно-температурными точками $1, 1'$ и $2, 2'$. Величину $G_2(12; 1'2')$ следует рассматривать как функцию Грина двух многократно взаимодействующих частиц [1]. При $1' = 1$ и $2' = 2$ она определяет вероятность найти две частицы в точках $1, 2$ при любых положениях остальных частиц. В классической статистической теории величину такого типа называют радиальной функцией распределения (см. 7.5). Чтобы определить вклад лестничных диаграмм (9.43) в сумму (9.42) нужно вновь вставить линию взаимодействия между координатами $1, 2$, замкнуть линии функций Грина, положив $1' = 1, 2' = 2$, не учитывать диаграмму с одной линией взаимодействия, как не дающую вклада из-за электронейтральности, и проинтегрировать по координатам $1, 2$. Тогда

$$\sum_{n=2} [C_n]'_{\text{св.}} = - \int [G_2(12; 12) - G^-(1; 1)G^-(2; 2)] \Phi(1, 2) d1 d2. \quad (9.45)$$

Рассмотрим вторую сумму ряда (9.42). Диаграмму, соответствующую общему члену ряда, удобно разрезать на три части



Тогда первая диаграмма в правой части является лестничной и их сумма описывается уравнением (9.45). Второй элемент, фактически, представляет собой сумму цепных диаграмм (9.1) для эффективного потенциала (9.12) (без кулоновского потенциала) с двумя дополнительными функциями Грина

$$= W^+(1'; 1) = \int [\Phi^{\ominus\Phi\Phi}(1'; 1'') - \Phi(1'; 1'')] G^+(1'; 1'') G^+(1''; 1) d1'' \quad (9.47)$$

Используя этот результат и уравнение (9.44), легко "собрать" требуемую диаграмму, соединяя элементы в точках $1', 1, 2$ и полагая $2'=2$.

$$\sum_{n=4}^{\infty} [C_n]''_{\text{св.}} = \frac{3}{2} \int W^+(1'; 1) [G_2(1'2; 12) - G^-(1'; 1)G^-(2; 2)] \Phi^{\ominus\Phi\Phi}(1; 2) d1' d1 d2 \quad (9.48)$$

Коэффициент 3 отражает здесь тот факт, что диаграмму можно образовать тремя способами, циклически переставляя петли 123, 312, 231. Коэффициент $1/2$ введен, чтобы исключить тождественные перестановки 321, 213, 123. Уравнение (9.44) и выражения (9.45), (9.48) исследуем в рамках статистики Больцмана. Для газа электронов эффекты и вырождения будем учитывать только в первом порядке по параметру

$\lambda_e \kappa$, а ионный газ считать классическим. В то же время прямое взаимодействие между электронами и ионами рассмотрим на основе квантовых законов. При расчетах ионы условно можно считать ферми-газом, так как больцмановский предел для обеих статистик одинаков. Предельные больцмановские значения для функций Грина получаются, если в (8.60) положить $1 + \eta n_k \simeq 1$, в (8.61) n_k взять в виде (8.91). Переходя далее от суммирования по \mathbf{k} и интегрированию, будем иметь

$$G^+(1; 1') = \left[\frac{m_1}{2\pi\hbar^2\tau_1} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)^2}{2\hbar\tau_1} + \mu_1\tau_1 \right\}, \quad (9.49)$$

$$G^-(1; 1') = \left[\frac{m_1}{2\pi\hbar^2(\beta + \tau_1)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)^2}{2\hbar(\beta + \tau_1)} + \mu_1(\beta + \tau_1) \right\} \quad (9.50)$$

где $\tau_1 = \beta_1 - \beta'_1$. Используя в пределах указанных допущений выражение (9.49), а также дебаевский эффективный потенциал (9.20), вычислим интеграл (9.47)

$$\begin{aligned} W^+(1'; 1) &= e_1^2 \int \int_0^{\beta'_1} \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}''_1|} - 1}{|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}''_1|} \delta(\beta'_1 - \beta''_1) G^+(\mathbf{r}'_1\beta'_1; \mathbf{r}''_1\beta''_1) G^+(\mathbf{r}''_1\beta''_1; \mathbf{r}_1\beta_1) d\beta''_1 d^3r''_1 = \\ &= \frac{e_1^2}{2} \int \frac{e^{-\kappa|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}''_1|} - 1}{|\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}''_1|} \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}''_1) G^+(\mathbf{r}''_1\beta'_1; \mathbf{r}_1\beta_1) d^3r''_1 = \frac{e_1^2\kappa}{2} G^+(\mathbf{r}'_1\beta'_1; \mathbf{r}_1\beta_1). \end{aligned} \quad (9.51)$$

Здесь при интегрировании по β''_1 учтено свойство δ -функции

$$\int_0^a f(x)\delta(b-x)dx = \frac{1}{2}f(a), \text{ если } b=a.$$

После этого в одной из функций Грина температурные переменные становятся одинаковыми и она вырождается в δ -функцию (функция (9.49) является производящей для δ -функции при $\tau_1 \rightarrow 0$)

$$G^+(\mathbf{r}'_1\beta'_1; \mathbf{r}''_1\beta'_1) \rightarrow \delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}''_1), \quad (9.52)$$

что приводит к последнему выражению в (9.51), полученному в больцмановском приближении. Рассмотрим далее классический предел функции (9.51). Его можно получить, устремляя \hbar к нулю в формуле (9.49), что приводит к результату (9.52). С другой стороны этот результат получен при $\tau_1 \rightarrow 0$. (Это очевидно, так как τ_1 и \hbar^2 входят в виде произведения). Последнее обстоятельство отражает тот факт, что в классической физике взаимодействие локально и происходит при постоянной температуре. При круговом обходе замкнутой петли δ -функция возникает от каждой линии Грина и петля стягивается к точке в конфигурационном пространстве, что и отражено в классической диаграммной технике (см.7.4). Таким образом, вместо (9.51), в классическом случае будем иметь

$$W^+(\mathbf{r}'_1\beta'_1; \mathbf{r}_1\beta'_1) \rightarrow \frac{1}{2}e_1^2\kappa\delta(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_1). \quad (9.53)$$

Подставим функцию (9.53) в интеграл (9.48) и произведем интегрирование по координате $1'$, учитывая предельный переход $\tau_1 = \beta'_1 - \beta_1 \rightarrow 0$. Учтем также, что элемент (9.47) может быть присоединен как к левой, так и правой петле диаграммы

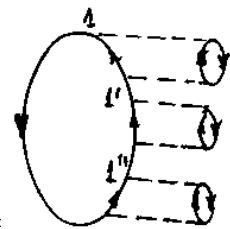
(9.46). Интеграл (9.48) при этом не изменится, но для того, чтобы получить выражение, описывающее систему частиц разных сортов, нужно в формуле (9.53) квадрату заряда приписать разные индексы, в зависимости от того к какой петле относится элемент (9.47). Это учитывается с помощью множителя $1/2 (e_1^2 + e_2^2)$. В результате будем иметь

$$\sum_{n=4}^{\infty} [C_n]_{\text{св}} = -\frac{3}{8} \kappa (e_1^2 + e_2^2) \int [G_2(12; 12) - G_2^-(1; 1)G_2^-(2; 2)] \Phi^D(1; 2) d1d2. \quad (9.54)$$

Следует отметить, что формула (9.54) имеет более узкую область применимости, чем (9.45). При выводе последней не накладывалось ограничений на вид статистики и пределы ее применимости находятся в рамках двухчастичной задачи с эффективным потенциалом, что дает возможность рассматривать вклад в термодинамический потенциал пропорциональный параметру ζ^2 включительно для любой статистики. При выводе формулы (9.54) были введены дополнительные ограничения, связанные с использованием статистики Больцмана и применением предельных классических выражений (9.20) и (9.53). Это позволяет правильно учитывать обменные эффекты лишь в первом порядке по параметру $\lambda_e \kappa$. С другой стороны, формула (9.54), по сравнению с (9.45), учитывает следующий порядок по параметру ζ , который, как будет видно из дальнейшего, соответствует $\zeta^{5/2}$. Общая же ценность результатов (9.45) и (9.54) заключается в том, что они содержат двухчастичную функцию Грина $G_2(12; 12)$, описывающую квантовый характер прямых многократных взаимодействий на малых расстояниях и экранировку на больших расстояниях. Это дает возможность определить конечный вклад в термодинамический потенциал в виде разложения до членов порядка $\zeta^{5/2}$ включительно. С учетом сделанных замечаний формулы (9.45) и (9.54) можно объединить в одну

$$\sum_n [C_n]_{\text{св}} = - \left[1 + \frac{3}{8} \kappa (e_1^2 + e_2^2) \beta \right] \int [G_2(12; 12) - G_2^-(1; 1)G_2^-(2; 2)] \Phi^D(1; 2) d1d2. \quad (9.55)$$

Отметим, что лестничное приближение (9.45) полностью описывает квантовый аналог второго группового интеграла (7.27) [29], [16]. Однако, для системы заряженных частиц использовать групповые разложения типа (7.34), (7.35) при $k > 2$ нужно с осторожностью, поскольку возникают дробные степени параметра ζ и одинаковые их порядки могут присутствовать в различных групповых интегралах. Например, выражение (9.54) содержится в квантовом аналоге третьего группового интеграла (7.28), но такой же порядок $\zeta^{5/2}$ дает диаграмма, которая содержится в



(9.56)

четвертом групповом интеграле. Имея в виду оценить полный вклад в термодинамический потенциал порядка $\zeta^{5/2}$, вычислим классический предел для этой диаграммы. В общем случае, чтобы перейти к классическому пределу в любом квантовом выражении, нужно найти классические пределы для

функций Грина (9.49) и (9.50). Для функции (9.49) таким пределом является δ -функция (9.52). Используя тот же принцип локальности взаимодействия для опере-

жающей функции Грина (9.50), при $\tau_1 \rightarrow 0$ будем иметь

$$G^-(\mathbf{r}_1\beta'_1; \mathbf{r}'_1\beta'_1) \rightarrow \zeta_1 \exp \left\{ -\frac{m_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)^2}{2\hbar^2\beta} \right\}. \quad (9.57)$$

Заметим, что диаграмма (9.56) состоит из трех элементов (9.47). Это можно определить, если разрезать диаграмму в узлах, отмеченных координатами $1, 1', 1''$. Как видно, оба верхних элемента соответствуют выражению (9.47). Нижний элемент содержит дырочную функцию Грина

$$W^-(1''; 1) = \int [\Phi^{\ominus\Phi\Phi}(1''; 2) - \Phi(1''; 2)] G^+(1''; 2)G^-(2; 1)d2. \quad (9.58)$$

Таким образом, диаграмме (9.56) соответствует выражение

$$C_{8,4}^{(6.4)} = 4 \int W^+(1; 1')W^+(1'; 1'')W^-(1''; 1)d1d1'd1''. \quad (9.59)$$

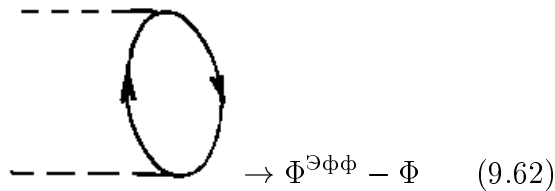
Коэффициент указывает, что диаграмма может быть образована четырьмя способами. Вычислим (9.58) и (9.59) в классическом предельном случае. Подставляя в (9.58) выражения (9.52) и (9.57), получим

$$W^-(\mathbf{r}''_1\beta_1; \mathbf{r}_1\beta_1) \rightarrow -\frac{1}{2}e_1^2\kappa G^-(\mathbf{r}''_1\beta_1; \mathbf{r}_1\beta_1). \quad (9.60)$$

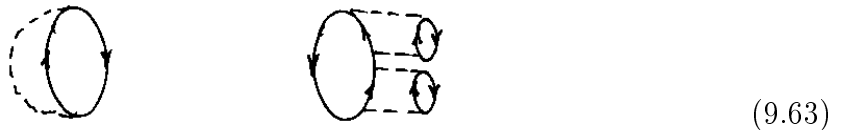
Вычисляя с помощью (9.53) и (9.60) интеграл (9.59), будем иметь

$$\frac{1}{V}C_{8,4}^{(6.4)} \rightarrow -\frac{1}{2}e_1^6\zeta_1\beta^3\kappa^3 = -\frac{1}{2}Z_1^6\zeta_1\Gamma^3. \quad (9.61)$$

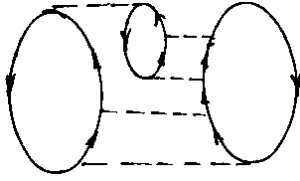
Последнее выражение записано в терминах параметра взаимодействия (9.29) и зарядового числа Z_1 . Вид формулы (9.61) требует определенных пояснений, поскольку рассматривалась четырехчастичная диаграмма, а в результате получилось одночастичное выражение. Это связано с тем, что в диаграмме одна петля соединена с тремя элементами, каждый из которых описывается выражением для эффективного потенциала (9.9) без кулоновского потенциала. Диаграммами такого класса являются кольцевые диаграммы и первая диаграмма второй суммы (9.42), приведенные в (9.63). С физической точки зрения указанные диаграммы описывают все более усложняющийся процесс экранировки одной частицы



всеми остальными, так что каждый элемент (9.62) дает вклад в термодинамический потенциал порядка Γ (см. (9.32) и (9.61)).



Имеется еще одна диаграмма, которая пропорциональна параметру $\zeta^{5/2}$, приведенная в (9.64). Выражение для нее составляется обычным путем. Соответствующие интегралы можно вычислить, если воспользоваться предельным значением функций Грина (9.52) и (9.57). Учитывая циклическую перестановку петель, будем иметь



$$C_{7,3}^{(5,3)} = \quad (9.64)$$

$$\frac{1}{V}C_{7,3}^{(5,3)} = \frac{1}{\kappa}8\pi^2\alpha\beta^5\zeta_1\zeta_2\zeta_3e_1^3e_2^3e_3^3(e_1 + e_2 + e_3) = \frac{\alpha}{8\pi\kappa^3}\Gamma^2\kappa_1^2\kappa_2^2\kappa_3^2Z_1Z_2Z_3(Z_1 + Z_2 + Z_3), \quad (9.65)$$

где

$$\alpha = \frac{\pi^2}{6} - \ln^2 \frac{3}{4} - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4^k \cdot k^2} \simeq 1,0293.$$

Чтобы определить вклад в термодинамический потенциал от лестничных диаграмм, необходимо найти решение уравнения (9.44). Для этого удобнее перейти от интегрального уравнения к дифференциальному. Сначала заметим, что функции (9.49), (9.50) и их произведения удовлетворяют уравнению Блоха (8.20) [23]. Например, для произведения из двух опережающих функций Грина имеем

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{\mathbf{r}_2} - \mu_1 - \mu_2 \right) G^-(\mathbf{r}_1, \beta + \tau; \mathbf{r}'_1 \beta'_1) G^-(\mathbf{r}_2, \beta + \tau; \mathbf{r}'_2 \beta'_2) = \\ = \delta(\beta + \tau - \beta'_1 + \beta'_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2), \end{aligned} \quad (9.66)$$

где $\tau = \beta_1 - \beta_2$. Аналогичное уравнение имеет место и для произведения запаздывающих функций Грина, если в правой части произвести замену $\delta(\beta + \tau - \beta'_1 + \beta'_2) \rightarrow \delta(\tau - \beta'_1 + \beta'_2)$. Если оператором в левой части уравнения (9.66) подействовать на обе части уравнения (9.44), то тогда получим дифференциальное уравнение Блоха для двухчастичной функции Грина

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{\mathbf{r}_2} - \mu_1 - \mu_2 + \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \beta + \tau; \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2 \tau) = \\ = \delta(\beta + \tau - \tau') \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'_2), \end{aligned} \quad (9.67)$$

где $\tau' = \beta'_1 - \beta'_2$. Введем вместо радиусов-векторов частиц $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ новые переменные \mathbf{R} и \mathbf{r} :

$$\mathbf{R} = \frac{1}{M_{12}}(m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (9.68)$$

Вектор \mathbf{r} соответствует взаимному расстоянию между частицами, \mathbf{R} - радиус-вектор центра инерции частиц. В этих переменных гамильтониан в (9.67) имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \Delta_{\mathbf{r}_1} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \Delta_{\mathbf{r}_2} + \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2M_{12}} \Delta_{\mathbf{R}} + \Phi(\mathbf{r}).$$

Здесь $\Delta_{\mathbf{R}}, \Delta_{\mathbf{r}}$ - операторы Лапласа соответственно по компонентам векторов \mathbf{R} и \mathbf{r} , $M_{12} = m_1 + m_2$ - полная масса системы, $m_{12} = m_1 m_2 / M_{12}$ - приведенная масса.

Таким образом, гамильтониан имеет две независимые части. Соответственно этому решение уравнения (9.67) в переменных (9.68) можно искать в виде произведения

$$G_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \beta + \tau; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2, \tau') = \left[\frac{M_{12}}{2\pi\hbar^2(\beta + \tau - \tau')} \right]^{3/2} \cdot \exp \left\{ \frac{M_{12}(\mathbf{R} - \mathbf{R}')^2}{2\pi\hbar^2(\beta + \tau - \tau')} + (\mu_1 + \mu_2)(\beta + \tau - \tau') \right\} G_2(\mathbf{r}, \beta + \tau; \mathbf{r}', \tau'), \quad (9.69)$$

где первая функция в правой части описывает движение центра инерции частиц, вторая функция - относительное движение частиц и удовлетворяет уравнению

$$\left[\frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{\hbar^2}{2m_{12}} \Delta_{\mathbf{r}} + \Phi(\mathbf{r}) \right] G_2(\mathbf{r}_1, \beta + \tau; \mathbf{r}'_1, \tau') = \delta(\beta + \tau - \tau') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Решение этого уравнения можно представить в виде разложения

$$G_2(\mathbf{r}_1, \beta + \tau; \mathbf{r}'_1, \tau') = \sum_{\{n\}} \Psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-(\beta + \tau - \tau')E_n} \Psi_n(\mathbf{r}). \quad (9.70)$$

Здесь E_n и $\Psi_n(\mathbf{r})$ соответственно собственные значения и собственные функции уравнения Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m_{12}} \Delta_{\mathbf{r}} \Psi_n(\mathbf{r}) + [E_n - \Phi(\mathbf{r})] \Psi_n(\mathbf{r}) = 0. \quad (9.71)$$

Суммирование в (9.70) производится по всем квантовым числам, характеризующим систему двух частиц. Используя представления (9.69) и (9.70) для двухчастичной функции Грина, можно записать выражение для суммы лестничных диаграмм (9.55) в терминах величин E_n и $\Psi_n(\mathbf{r})$ и, таким образом, свести задачу к решению уравнения (9.71). Для этого следует записать подинтегральное выражение в (9.55) в буквенном выражении (в соответствии с (8.49), произвести замену переменных в соответствии с (9.68), положить в формулах (9.69), (9.70) $\mathbf{R}' = \mathbf{R}$, $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$, $\tau' = \tau$ и подставить их в (9.55), использовать дебаевский потенциал (9.20) в форме (8.48) и выполнить элементарное интегрирование по переменным \mathbf{R} , β_1, β_2 . В результате будем иметь

$$\frac{1}{V} \sum_n [C_n]_{\text{св}} = -\zeta_a \zeta_b \lambda_{ab}^3 \beta \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \int \sum_{\{n\}} \left\{ \Psi_n^*(\mathbf{r}) e^{-\beta E_n} \Psi_n(\mathbf{r}) - \Psi_n^{o*}(\mathbf{r}) e^{-\beta E_n^o} \Psi_n^o(\mathbf{r}) \right\} \Phi_{ab}^D(\mathbf{r}) d^3 r. \quad (9.72)$$

Здесь индексом "о" отмечены собственные значения и собственные функции уравнения (9.71) при $\Phi_{ab}^D = 0$; индексы 1 и 2 при параметрах замены на a и b , указывающие сорта частиц; введена также длина волны Де-Бройля пары частиц

$$\lambda_{ab} = \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m_{ab}} \right)^{1/2}. \quad (9.73)$$

В ряде случаев удобно использовать формулу (9.72) в импульсном представлении. Применение преобразования Фурье для волновых функций и потенциала (8.44) приводит к выражению

$$\frac{1}{V} \sum_n [C_n]_{\text{св}} = -\zeta_a \zeta_b \lambda_{ab}^3 \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 Z_b^2) \right].$$

$$\cdot \frac{\beta}{(2\pi)^3} \sum_{\{n\}} \int d^3 k \left\{ \left(E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{ab}} \right) \left(e^{-\beta E_n} - e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m_{ab}} \right) \Psi_n^*(\mathbf{k}) \Psi_n(\mathbf{k}) \right\}. \quad (9.74)$$

Волновые функции удовлетворяют интегральному уравнению Шредингера

$$\left(E_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{ab}} \right) \Psi_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k' \Phi_{ab}^D(|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|) \Psi_n(\mathbf{k}').$$

Вклад в термодинамический потенциал от лестничного приближения получается, если формулу (9.72) (или (9.74)) подставить в выражение (8.68)

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta \Omega_{ab}}{V} &= \zeta_a \zeta_b \lambda_{ab}^3 \beta \frac{1}{2} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \\ &\cdot \sum_{\{n\}} \int d^3 r \left\{ \Psi_n^*(\mathbf{r}) e^{-\beta E_n} \Psi_n(\mathbf{r}) - \Psi_n^{o*}(\mathbf{r}) e^{-\beta E_n^o} \Psi_n^o(\mathbf{r}) \right\} \Phi_{ab}^D(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (9.75)$$

Заметим, что эта формула отличается от обычного лестничного приближения наличием величины $3/8 \Gamma(Z_a^2 + Z_b^2)$, которая появилась в результате учета вклада лестничных диаграмм с дополнительной петлей (9.48). Как уже отмечалось, это дает возможность применять данное приближение в виде разложения по параметру ζ с точностью до членов $\sim \zeta^{5/2}$ включительно. Однако, чтобы полностью учесть указанный порядок, к (9.75) нужно добавить вклады (9.61) и (9.65). Переходя здесь к буквенным обозначениям, составим сумму по всем сортам частиц и подставим ее в общую формулу (8.68). Выполняя затем интегрирование по зарядовой переменной, получим

$$\begin{aligned} -\frac{\beta \Delta \Omega'}{V} &= \sum_c \frac{1}{2V} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} C_{8,4}^{(6,4)} = -\frac{1}{18} \Gamma^3 \sum_c Z_c^6 \zeta_c = -\frac{\kappa^3}{12\pi 6} \Gamma^2 \sum_c Z_c^4 \nu_c \\ -\frac{\beta \Delta \Omega''}{V} &= \sum_c \frac{1}{2V} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} C_{7,3}^{(5,3)} = \frac{\alpha}{24\pi} \frac{(\beta e^2)^2}{\kappa} \left(\sum_c Z_c \kappa_c^2 \right)^2 \left(\sum_c Z_c^2 \kappa_c^2 \right) = \\ &= \frac{\kappa^3}{12\pi} \frac{\alpha \Gamma^2}{2} \left(\sum_c Z_c \nu_c \right)^2 \left(\sum_c Z_c^2 \nu_c \right). \end{aligned} \quad (9.76)$$

В последних формулах использовалось представление (9.32) и обозначение $\nu_c = \kappa_c^2 / \kappa^2$. Таким образом, в пределах сделанных допущений, общее выражение для термодинамического потенциала получается при суммировании вкладов (9.34), (9.75) и (9.76)

$$\frac{\beta \Omega}{V} = \frac{\beta}{V} \left[\Omega_0 + \Delta \Omega' + \Delta \Omega'' + \sum_{a,b} \Delta \Omega_{ab} \right]. \quad (9.77)$$

В следующих разделах на основе формулы (9.77) будут рассмотрены выражения для термодинамических функций неидеальной невырожденной плазмы.

9.3 Непрерывный спектр. Квазиклассическое приближение

Исходя из результатов, полученных в предыдущих разделах, рассмотрим главную задачу - получение явных зависимостей термодинамических функций от параметров

μ, β, V в большом каноническом ансамбле (или от параметров N, β, V в каноническом ансамбле). Ввиду зависимости величин $\Psi_n(\mathbf{r}), E_n$ и $\Phi_{ab}^D(\mathbf{r})$ от параметра активности ζ , разложение по этому параметру выражения (9.72) должно содержать любые его степени и, как было уже отмечено, члены вида $\zeta^{n+1/2} \ln \zeta$ и $\zeta^{n+1/2}$. Поэтому разложения для термодинамических функций должны содержать указанный параметр в пределах точности исходных предположений. Одним из таких предположений является условие $(\lambda_e \kappa)^2 \ll 1$, что даст возможность использовать при анализе ряда теории возмущений бoльцмановскую статистику и главным параметром разложений считать ζ (отбор диаграмм проводился по принципу присутствия в диаграмме наибольшего числа линий частиц, что соответствует наименьшим степеням параметра ζ). Поскольку были рассмотрены все диаграммы, дающие в термодинамический потенциал вклады $\zeta^{5/2} \ln \zeta$ и $\zeta^{5/2}$ включительно, то и при всех последующих вычислениях нужно ограничиться этой точностью. В общем случае решить уравнение (9.71) при дебаевском потенциале (9.20) можно только численно [16], поэтому для вычисления волновых функций $\Psi_n(\mathbf{r})$ и собственных значений E_n воспользуемся приближенными методами. Рассмотрим вначале непрерывный спектр положительных значений энергии $E_n > 0$. Известно, что в случае центрально-симметричного потенциала волновая функция удовлетворяет следующему условию в сферических координатах r, ϑ, φ [39]:

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad (9.78)$$

где $Y_{l,m}$ нормированная угловая часть волновой функции, выражающаяся через сферические функции, l - квантовое число момента импульса, m - положительные и отрицательные целые числа, характеризующие проекции момента импульса. Радиальная часть волновой функции $R_{n,l}(r)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_{n,l}}{dr} \right) + \frac{2m_{a,b}}{\hbar^2} \left[E_n - \Phi_{a,b}^D - \frac{\hbar^2}{2m_{ab}} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{n,l} = 0. \quad (9.79)$$

Воспользуемся квазиклассическим решением этого уравнения

$$\kappa R_{n,l}(r) = \frac{C}{\sqrt{p(r)}} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_{r_0}^r p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right). \quad (9.80)$$

Здесь C - нормировочная постоянная. Величина

$$p(r) = \sqrt{2m_{a,b} \left(E_n - \Phi_{a,b}^D - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_{ab} r^2} \right)} \quad (9.81)$$

является квазиклассическим относительным импульсом, где присутствует центробежная энергия $\hbar^2 l(l+1)/2m_{ab} r^2$. Условием применимости решения (9.80) является

$$\frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda(r)}{dr} \right| \ll 1, \quad (9.82)$$

где $\lambda(r) = 2\pi\hbar/p(r)$ - де-бройлеровская длина волны частицы. Из (9.82) и (9.81) следует, что квазиклассическое приближение неприменимо при малом импульсе частицы. В частности, оно заведомо неприменимо вблизи точки поворота r_0 (нижний предел интеграла в выражении (9.80)), где, согласно классической механики, частица

должна останавливаться, после чего двигаться в обратном направлении. Указанные точки определяются из условия $p(r_0) = 0$. При $l = 0$ условию (9.82) должна удовлетворять потенциальная энергия Φ_{ab}^D и тогда волновая функция (9.80) применима во всем пространстве. Если $l \neq 0$, то условию (9.82) должна удовлетворять также и центробежная энергия. При этом в области малых r , где центробежная энергия порядка величины полной энергии, длина волны $\lambda = 2\pi\hbar/p \sim 2\pi r/l$ и условие (9.82) дает $l \gg 1$. Таким образом, в области малых r условие квазиклассичности может нарушаться центробежной энергией. Это обстоятельство нужно учитывать при вычислении сумм и интегралов в выражении (9.75). Подставим (9.78) в выражение (9.75) и проинтегрируем по угловым координатам ϑ, φ

$$\frac{\beta\Delta\Omega_{a,b}}{V} = \zeta_a\zeta_b\lambda_{a,b}^3 \frac{1}{2} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{4}\Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \int_0^\infty \sum_{n,l} (2l+1) \left\{ e^{-\beta E_n} R_{n,l}^2(r) - e^{-\beta E_n^o} R_{n,l}^o(r) \right\} \Phi_{a,b}^D(r) r^2 dr. \quad (9.83)$$

Здесь $R_{n,l}^o$ и E_n^o - соответственно волновые функции и собственные значения уравнения (9.79) в отсутствии взаимодействия. В квазиклассическом случае число уровней велико и спектр их густ, поэтому суммы по n, l в (9.83) можно заменить интегралами по числу состояний [1]

$$d\Gamma(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp(x) dx = \int \frac{dp}{dE} \frac{dE dx}{2\pi\hbar} \quad (9.84)$$

и воспользоваться волновыми функциями (9.80). Возникающий при этом квадрат синуса является быстро осциллирующей функцией и ее с достаточной степенью точности можно заменить средним значением $1/2$. Учитывая это и принимая во внимание правило нормировки функций (9.80)

$$\frac{C^2}{2m_{a,b}} \int \frac{dp(x)}{dE} dx = \frac{C^2}{2} \int \frac{dx}{p(x)} = 1$$

выражение (9.83) преобразуем к виду

$$\frac{\beta\Delta\Omega_{a,b}}{V} = \zeta_a\zeta_b\lambda_{a,b}^3 \frac{\beta 2m_{a,b}}{\pi\hbar} \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{4}\Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \int_0^\infty \int \sum_l (2l+1) \left[\frac{e^{-\beta E}}{p(r, E)} - \frac{e^{-\beta E}}{p^o(r, E)} \right] \Phi_{a,b}^D(r) dE dr, \quad (9.85)$$

где $p^o(r, E)$ - значение импульса (9.81) при $\Phi_{a,b}^D = 0$. Далее в этом выражении следует перейти к интегрированию по моментам l

$$\sum_l \frac{2l+1}{p(l)} - \sum_l \frac{2l+1}{p^o(l)} \rightarrow \int_0^{l_1} \frac{2ldl}{\sqrt{2m_{a,b} \left(E - \Phi_{a,b}^D - l^2\hbar^2 / (2m_{a,b}r^2) \right)}} - \int_0^{l_0} \frac{2ldl}{\sqrt{2m_{a,b} \left(E - l^2\hbar^2 / (2m_{a,b}r^2) \right)}},$$

где

$$l_1 = \sqrt{\frac{2m_{a,b}r^2}{\hbar^2} (E - \Phi_{ab}^D)}, \quad l_0 = \sqrt{\frac{2m_{a,b}r^2}{\hbar^2} E}$$

- значения моментов в точках поворота. Выполняя интегрирование и подставляя результат в (9.85), получим

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta \Omega_{ab}}{V} &= 8\sqrt{\pi} \beta^{5/2} \zeta_a \zeta_b \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \\ &\cdot \int_0^\infty r^2 dr \int e^{-\beta E} (\sqrt{E - \Phi_{a,b}^D} - \sqrt{E}) \Phi_{a,b}^D dE. \end{aligned} \quad (9.86)$$

При интегрировании по E нужно учесть, что в классически доступной области $E - \Phi_{a,b}^D \geq 0$, тогда для одинаково заряженных частиц $\Phi_{a,b}^D > 0$ E изменяется в пределах $\Phi_{a,b}^D(r) \leq E < \infty$, что приводит к следующему выражению

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta \Omega_{ab}}{V} &= 4\pi \beta \zeta_a \zeta_b \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \\ &\cdot \int_0^\infty r^2 dr \left\{ \exp[-\beta \Phi_{a,b}^D] - 1 \right\} \Phi_{a,b}^D. \end{aligned} \quad (9.87)$$

Для разноименно заряженных частиц $\Phi_{a,b}^D < 0$ и для области положительных энергий $0 \leq E < \infty$ получается другой результат

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta \Omega_{ae}^{(+)}}{V} &= 4\pi \beta \zeta_a \zeta_e \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \\ &\cdot \int_0^\infty r^2 dr \left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta \Phi_{a,e}^D) \Gamma\left(\frac{3}{2}; -\beta \Phi_{a,e}^D(r)\right) - 1 \right\} \Phi_{a,e}^D, \end{aligned} \quad (9.88)$$

где $\Gamma\left(\frac{3}{2}; -\beta \Phi_{a,e}^D\right)$ - неполная гамма-функция [1]. Под знаком интеграла в выражении (9.87) стоит классическая корреляционная функция (7.53), вычисленная в приближении (7.45) и совпадающая с функцией Майера (7.22). В (9.88) под знаком интеграла вместо классического значения, дающего при $e_a e_b < 0$ сильную экспоненциальную расходимость интеграла при $r \rightarrow 0$, содержится величина

$$g_{ae} = \exp\left(\frac{\beta e_a e}{r} e^{-\kappa r}\right) \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2} \frac{\beta e_a e}{r} e^{-\kappa r}\right) - 1, \quad (9.89)$$

которая при $r \rightarrow 0$ хотя и стремится к бесконечности, но как \sqrt{r} . Эта особенность является интегрируемой и, следовательно, термодинамический потенциал является конечной величиной. По аналогии с (7.53) величину (9.89) можно отождествить с корреляционной функцией для разноименно заряженных частиц. Формула (9.88) получена в предположении, что заряженные частицы имеют положительные энергии и при взаимодействии лишь рассеиваются, не образуя связанных состояний. Однако при умеренных температурах ($T \leq 1$ эВ) значительная часть электронов в плазме может находиться в связанных состояниях дискретного спектра с отрицательной энергией. Поэтому возникает проблема одновременного учета всего энергетического спектра частиц, охватывающего как свободные, так и связанные состояния. Рассмотрим указанную проблему, используя следующий приближенный подход: область

отрицательных энергий вблизи нулевой энергии, где уровней достаточно много и спектр их густ, будем описывать с помощью с помощью квазиклассической волновой функции (9.80); для дискретных уровней энергии возьмем кулоновские волновые

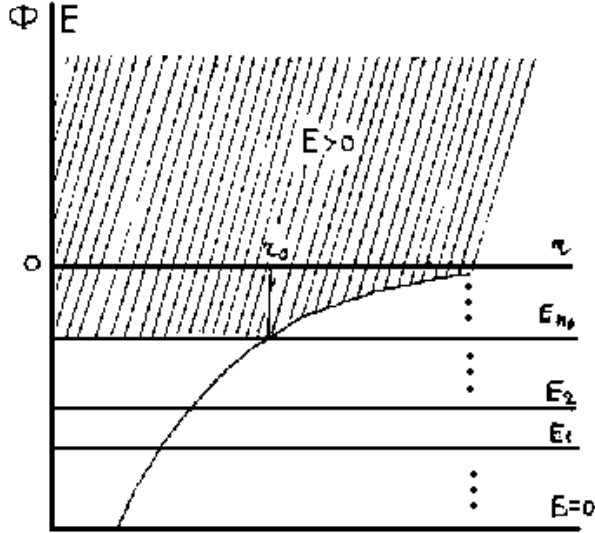


Рис. 9.1: Потенциальная энергия для случая притяжения к центру. Заштрихована область, где используется квазиклассическое приближение. При $E_{n_0} \leq E < \infty$ энергетический спектр непрерывен, для $E < E_{n_0}$ - дискретный, I - потенциал ионизации, r_0 - координата точки поворота.

для термодинамического потенциала получается выражение (9.86), где под знаком интеграла отсутствует слагаемое \sqrt{E} , соответствующее положительным энергиям. Области интегрирования по E и r здесь взаимосвязаны. В интервале $0 \div r_0$, где r_0 - корень уравнения

$$E_{n_0} - \Phi_{a,e}^D(r_0) = 0, \quad (9.91)$$

энергия меняется в пределах $E_{n_0} \leq E \leq 0$; в интервале $r_0 \div \infty$ в пределах $\Phi_{a,e}^D \leq E \leq 0$. Выполняя с учетом указанных обстоятельств интегрирование в (9.86) по переменной E , получим

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta \Omega_{\kappa}^{(-)}}{V} &= 4\pi \beta \zeta_a \zeta_e \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma(Z_a^2 + 1) \right] \\ &\left\{ \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{r_0} \exp(-\beta \Phi_{a,e}^D) \left[\Gamma\left(\frac{3}{2}; -\beta \Phi_{a,e}^D + \beta E_{n_0}\right) - \right. \right. \\ &\left. \left. - \Gamma\left(\frac{3}{2}; -\beta \Phi_{a,e}^D\right) \right] r^2 \Phi_{a,e}^D dr - \int_{r_0}^{\infty} \exp(-\beta \Phi_{a,e}^D) \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}; -\beta \Phi_{a,e}^D\right) - 1 \right] \Phi_{a,e}^D r^2 dr \right\}. \end{aligned}$$

Если это выражение сложить с (9.88), то получим вклад в термодинамический потенциал от квазиклассической части спектра отрицательных и положительных энергий

$$\frac{\beta \Delta \Omega_{a,e}}{V} = \frac{\beta \Delta \Omega_{a,e}^{(+)}}{V} + \frac{\beta \Delta \Omega_{a,e}^{(-)}}{V} =$$

функции (с поправкой на экранировку). Таким образом разделим энергетический спектр на две части - непрерывную квазиклассическую и дискретную. Для этого в сумме по $\{n\}$ в выражении (9.83) выберем такой номер главного квантового числа n_0 , при котором

$$|\beta E_{n_0}| \ll 1. \quad (9.90)$$

Схема условного разделения энергетического спектра на две части - непрерывную и дискретную представлена на рис. 9.1 спектр отрицательных энергий $E_{n_0} \leq E_n \leq 0$ при условии (9.90) можно считать сплошным и соответствующую часть суммы по $\{n\} > n_0$ в выражении (9.83) можно заменить интегралом, воспользовавшись для волновых функций и плотности уровней энергии формулами (9.80) и (9.84). При этом

$$\begin{aligned}
 &= 4\pi\beta\zeta_a\zeta_e \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8}\Gamma(Z_a^2 + 1) \right] \left\{ \int_{r_0}^{\infty} \left[\exp(-\beta\Phi_{a,e}^D) - 1 \right] \Phi_{a,e}^D r^2 dr + \right. \\
 &\quad \left. \int_0^{r_0} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-\beta\Phi_{a,e}^D) \Gamma\left(\frac{3}{2}; -\beta\Phi_{a,e}^D + \beta E_{n_0}\right) - 1 \right] \Phi_{a,e}^D r^2 dr \right\}. \quad (9.92)
 \end{aligned}$$

Следующей задачей является вычисление интегралов в выражениях (9.87) и (9.92) по пространственной координате r . Точные их значения получить нельзя, но в этом нет необходимости, поскольку в пределах рассматриваемых приближений для термодинамического потенциала достаточно ограничиться разложением по параметру ζ до порядков $\zeta^{5/2} \ln \zeta$, $\zeta^{5/2}$ включительно. Поэтому для подинтегральных выражений нужно найти разложения, после интегрирования которых получилась бы сумма вида

$$-\frac{\beta\Delta\Omega}{V} = a_1\zeta^{3/2} + a_2\zeta^2 \ln \zeta + a_3\zeta^2 + a_4\zeta^{5/2} \ln \zeta + a_5\zeta^{5/2}, \quad (9.93)$$

где a_1, \dots, a_5 - коэффициенты, зависящие от температуры. В рассматриваемых выражениях удобно ввести вместо величин ζ_a обратные дебаевские радиусы для сортов частиц

$$\kappa_a = \left(4\pi\beta Z_a^2 e^2 \zeta_a \right)^{1/2}, \quad (9.94)$$

и перейти к безразмерным переменным интегрирования $e^2 \rightarrow e^2 g$, $r\kappa \rightarrow tg^{1/2}$. Проведем это, получим

$$-\frac{\beta\Delta\Omega_{ab}}{V} = \frac{\kappa_a^2 \kappa_b^2}{12\pi\kappa} I_{ab}, \quad (9.95)$$

где для одинаково заряженных частиц (a, b - ионы или электроны)

$$\begin{aligned}
 I_{ab}(\Gamma) &= \frac{3}{Z_a Z_b \Gamma} \int_0^1 dg \int_0^{\infty} \left[1 + \frac{3}{8}\Gamma g^{3/2} (Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot \\
 &\quad \cdot \int_0^{\infty} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{Z_a Z_b \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2}t}\right) \right\} e^{-g^{1/2}t} t dt. \quad (9.96)
 \end{aligned}$$

Для частиц с зарядом разных знаков

$$\begin{aligned}
 I_{\kappa}(\Gamma, t_0) &= \frac{3}{Z_a \Gamma} \int_0^1 dg \int_0^{\infty} \left[1 + \frac{3}{8}\Gamma g^{3/2} (Z_a^2 + 1) \right] \left\{ \int_{t_0}^{\infty} t dt \left[\exp\left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2}t}\right) - 1 \right] e^{-g^{1/2}t} + \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^{t_0} t dt \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2}t}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}; \frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2}t} - \frac{Z_a \Gamma g}{t_0} e^{-g^{1/2}t_0}\right) - 1 \right] e^{-g^{1/2}t} \right\}. \quad (9.97)
 \end{aligned}$$

Коэффициент в правой части формулы (9.95) соответствует дебаевскому члену (9.36); интегралы (9.96) и (9.97) стремятся к единице при $\Gamma \rightarrow 0$. Чтобы от формулы (9.95) перейти к выражению вида (9.93), нужно приближенно вычислить интегралы (9.96) и (9.97) в виде разложений по параметру Γ с точностью до членов порядка $\Gamma \ln \Gamma$, Γ , $\Gamma^2 \ln \Gamma$ и Γ^2 включительно. Для интеграла (9.96) такая задача решается с помощью теории возмущений, где возмущением является разность между дебаевским и кулоновским потенциалами. Интегралы (9.97) зависят уже от двух параметров Γ и t_0 и здесь возникает проблема выбора двух величин, которые являлись бы возмущениями. Для этого рассмотрим представленные на рис. 9.1 классически доступные области справа и слева от точки поворота. Область справа от точки поворота, где

$r > r_0$ и $E > \Phi$, описывается первым интегралом в выражении (9.97). Здесь при условии (9.90) дебаевская энергия взаимодействия мала сама по себе и ее можно считать возмущением. Второй интеграл в указанном выражении описывает область слева от точки поворота ($r < r_0$, $E > \Phi$). Вглубь этой области эффект экранировки уменьшается и возмущением можно считать разность между дебаевским и кулоновским потенциалами. Величина r_0 , которая разделяет указанные области, определяется из уравнения (9.91). Для этого должны быть известны собственные значения уравнения (9.79). Как уже отмечалось в начале этого параграфа, для дебаевского потенциала точные их значения можно найти только численно. Однако в рассматриваемом случае этого не потребуются, если предположить, что существует такой номер главного квантового числа, при котором уровень E_{n_0} не только является квазиклассическим, но и близок к кулоновскому. Близость уровня E_{n_0} к кулоновскому можно оценить с помощью теории возмущений, считая возмущением разность между дебаевским и кулоновским потенциалами. Положим

$$E_{n_0} = E_{n_0}^k + E_{n_0}^{(1)}, \quad (9.98)$$

где

$$E_{n_0}^k = -\frac{m_e Z_a^2 e^4}{2\hbar^2 n_0^2} = -\frac{Z_a^2 e^2}{2a_0 n_0^2} \quad (9.99)$$

-кулоновский уровень энергии, $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0,529 \cdot 10^{-8}$ см - боровский радиус,

$$E_{n_0}^{(1)} = \int_0^\infty \frac{Z_a e^2}{r} (1 - e^{-\kappa r}) R_{n,e}^2(r) r^2 dr \simeq Z_a e^2 \kappa \int_0^\infty r^2 R_{n,e}^2(r) dr = Z_a e^2 \kappa \quad (9.100)$$

- малая поправка, определяемая с помощью указанного выше потенциала возмущений. Здесь взяты два первых члена разложения экспоненты в ряд Тейлора и учтено условие нормировки волновых функций. Величина (9.100) в первом приближении описывает сдвиг кулоновского уровня (9.99) при взаимодействии электрона с ионом (имеющим заряд Z_a) в электрическом поле окружающих частиц. Подставляя (9.100) в (9.98), и учитывая (9.99), будем иметь

$$E_{n_0} = E_{n_0}^k \left(1 - \frac{2a_0 \kappa n_0^2}{Z_a} \right). \quad (9.101)$$

Как видно, если $n_0 \ll (Z_a/2a_0\kappa)^{1/2}$, то отличием дебаевского уровня от кулоновского можно пренебречь. Используя формулу (9.101), оценим условия выполнения неравенства (9.90). Для этого, учитывая (9.99), запишем ее в виде

$$|\beta E_{n_0}| = \frac{Z_a^2 \beta e^2 \kappa}{2a_0 \kappa n_0^2} \left(1 - \frac{2a_0 \kappa n_0^2}{Z_a} \right) = \frac{Z_a^2 \Gamma}{2a_0 \kappa n_0^2} \left(1 - \frac{2a_0 \kappa n_0^2}{Z_a} \right).$$

Рассмотрим параметры сильнонеидеальной не полностью ионизованной водородоподобной плазмы ($Z_a = 1$), когда $\Gamma = 1$ и $T = 10^4$ °K. В этом случае $(2a_0 \kappa)^{1/2} \simeq 1/16$ и

$$|\beta E_{n_0}| = \left(\frac{16}{n_0} \right)^2 \left[1 - \left(\frac{n_0}{16} \right)^2 \right].$$

Если потребовать $|\beta E_{n_0}| = 0,1$, то из последнего соотношения следует $n_0 \simeq 15$, т.е. выбор необходимого главного квантового числа возможен и, следовательно, рассматриваемый подход при выводе формулы (9.97) оправдан. Используя формулу (9.101),

можно определить точку поворота r_0 , которая является пределом интегралов в выражении (9.97). Для этого в уравнении (9.91) в пределах рассматриваемой точности разложим экспоненту в ряд и ограничимся двумя членами

$$E_{n_0} \simeq -Z_a e^2 \left(\frac{1}{r_0} - \kappa \right).$$

Сравнивая это выражение с (9.101), получим

$$r_0 = \frac{2a_0 n_0^2}{Z_a}. \quad (9.102)$$

Указанный выше подход позволяет вычислить приближенно интегралы (9.96) и (9.97). Детали вычислений приведены в приложениях А и В. Здесь воспользуемся окончательными формулами (9.151) и (9.164)

$$I_{ab} = 1 + \frac{3}{16} (Z_a^2 + Z_b^2) + \frac{1}{2} Z_a Z_b \Gamma (2C + \ln(3Z_a Z_b \Gamma) - 2) + \frac{4}{9} (Z_a Z_b \Gamma)^2 \cdot \\ \cdot \left(2C + \ln(4Z_a Z_b \Gamma) - \frac{35}{12} \right) + \frac{\Gamma^2}{8} Z_a Z_b (Z_a^2 + Z_b^2) \left(2C + \ln(3Z_a Z_b \Gamma) - \frac{11}{6} \right), \quad (9.103)$$

$$I_{a,e} = 1 + \frac{3}{16} \Gamma (Z_a + 1) - \frac{1}{2} Z_a \Gamma \left[2C - \ln(3Z_a \Gamma) - 2 - \frac{3}{8} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \varepsilon^{1/2} + \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \varepsilon^{-1/2} \right] + \\ + \frac{1}{2} (Z_a \Gamma)^2 \left[\frac{8}{9} \left(2C + \ln 4Z_a \Gamma - \frac{35}{12} \right) - \frac{1}{4} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \left(2C + \ln(3Z_a \Gamma) - \frac{11}{6} \right) - \right. \\ \left. - \frac{15\sqrt{\pi}}{22} \varepsilon^{1/2} \left(1 - \frac{3}{10} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \right) + \frac{9\sqrt{\pi}}{7} \varepsilon^{-1/2} \left(1 - \frac{Z_a^2 + 1}{4Z_a} \right) + \frac{\sqrt{\pi}}{3} \varepsilon^{-3/2} \right]. \quad (9.104)$$

Безразмерный параметр ε в формуле (9.104) введен вместо $t_0 = r_0 \kappa$. Он характеризует отношение кулоновской энергии (9.99) к кинетической

$$\varepsilon = \frac{Z_a \Gamma}{t_0} = \frac{Z_a^2 \Gamma}{2a_0 \kappa n_0^2}. \quad (9.105)$$

Последнее равенство получается, если использовать формулу (9.102). Часть слагаемых в (9.104) зависят только от параметра Γ и описывает вклад от положительного спектра энергии; другая часть, содержащая параметр ε , относится к квазиклассическому спектру отрицательной энергии. Заметим, что члены, относящиеся к положительному спектру энергии, по абсолютной величине соответствуют выражению (9.103). Поэтому можно записать

$$I_{ab}^{(+)} = 1 + \frac{3}{16} (Z_a^2 + Z_b^2) + \frac{1}{2} Z_a Z_b \Gamma (2C + \ln |3Z_a Z_b \Gamma| - 2) + \frac{4}{9} (Z_a Z_b \Gamma)^2 \cdot \\ \cdot \left(2C + \ln |4Z_a Z_b \Gamma| - \frac{35}{12} \right) + \frac{\Gamma^2}{8} Z_a Z_b (Z_a^2 + Z_b^2) \left(2C + \ln |3Z_a Z_b \Gamma| - \frac{11}{6} \right), \quad (9.106)$$

где индексы a и b относятся как к положительно, так и отрицательно заряженным частицам. Оставшуюся часть членов в (9.104) разделим на две группы - в первую группу объединим все слагаемые с отрицательными степенями ε , во вторую группу

- с положительными степенями. Кроме того, чтобы получить явную зависимость от числа n_0 , вместо параметра (9.105) введем ридберг - единицу энергии, равную потенциалу ионизации водорода (9.37):

$$\beta R_y = \frac{\beta m_e e^4}{2\hbar^2} = \frac{\varepsilon n_0^2}{Z_a^2}.$$

Тогда первая и вторая группа членов приобретает соответственно вид

$$I_{a,e}^{(-)} = -\frac{3}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{Z_a^2 \beta R_y}} Z_a \Gamma \left\{ n_0 - \frac{6}{7} Z_a \Gamma \left(1 - \frac{Z_a^2 + 1}{4Z_a} \right) n_0 - \frac{2}{9} \frac{Z_a \Gamma}{Z_a^2 \beta R_y} n_0^3 \right\} \quad (9.107)$$

$$\Delta_{a,e} = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} Z_a \Gamma \sqrt{Z_a^2 \beta R_y} \left\{ 1 - \frac{10}{11} Z_a \Gamma \left(1 - \frac{3}{10} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \right) \right\} \frac{1}{n_0} \quad (9.108)$$

Таким образом, значение интеграла (9.104) представлено в виде трех членов

$$I_{a,e} = I_{a,e}^{(+)} + I_{a,e}^{(-)} + \Delta_{a,e}, \quad (9.109)$$

которые играют разные роли при вычислении вклада в термодинамический потенциал. Выбор числа n_0 определяется только условием (9.90) и оно не имеет конкретного значения. Это приводит к неопределенности значений двух последних членов в сумме (9.109), описывающих квазиклассический спектр отрицательных энергий. Однако, указанная неопределенность устраняется с помощью предельного перехода $n_0 \rightarrow \infty$, при котором $\Delta_{a,e} \rightarrow 0$ и $I_{a,e}^{(-)} \rightarrow \infty$. В следующем разделе мы увидим, что последний результат играет позитивную роль, поскольку компенсирует аналогичную расходимость в дискретном спектре энергии, что устраняет указанную неопределенность и приводит к конечному выражению для термодинамического потенциала.

9.4 Дискретный спектр

В этом разделе рассмотрим вклад в термодинамический потенциал от дискретного спектра энергии, которому соответствует область $E_n < E_{n_0}$ (см. рис. 9.1). Указанный вклад определяется частью суммы (9.83) по главным квантовым числам $1 \leq n \leq n_0$.

$$\frac{\beta \Delta \Omega_{a,e}^{(-)}}{V} = \zeta_a \zeta_e \frac{1}{2} \lambda_{a,e}^3 \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma (Z_a^2 + 1) \right] \sum_{n=1}^{n_0} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) e^{-\beta E_n} \int_0^\infty \beta \Phi_\kappa^D(r) R_{n,l}^2(r) r^2 dr \quad (9.110)$$

Собственные значения E_n и радиальные волновые функции $R_{n,l}$ должны определяться из решения уравнения Шредингера (9.79). В предыдущем разделе выбор уровня E_{n_0} определялся из условия, что все уровни $E_n < E_{n_0}$ мало отличаются от кулоновских и учитывалась только первая поправка (9.100), связанная с экранировкой. Поэтому в (9.110) величины E_n R_{nl} следует разложить в ряд теории возмущений и сохранить члены порядка Γ , которые дают вклад в термодинамический потенциал с точностью до членов порядка $\zeta^{5/2}$ включительно. Тогда волновые функции $R_{n,l}$ можно считать кулоновскими, а для E_n сохранить поправку первого приближения к кулоновским уровням энергии. Учитывая эти обстоятельства, используем в (9.110) следующие разложения в ряд Тейлора

$$\beta \Phi_{a,e}^D \simeq -\frac{\beta Z_a e^2}{r} + Z_a \Gamma, \quad \text{и } e^{-\beta E_n} \simeq e^{-\beta E_n^k} (1 - Z_a \Gamma),$$

где E_n^k - кулоновские уровни энергии (9.99).

Известно, что в первом приближении теории возмущений интеграл от квадрата волновых функций отличается от единицы лишь на величину второго порядка малости [39]. Тогда, считая в интеграле (9.110) волновые функции кулоновскими, будем иметь

$$\beta \int_0^\infty \Phi_\kappa^D(r) R_{n,l}^2(r) r^2 dr \simeq -Z_a \beta e^2 \int_0^\infty R_{n,l}^2(r) r dr + Z_a \Gamma \int_0^\infty R_{n,l}^2(r) r^2 dr = 2\beta E_n^k + Z_a \Gamma.$$

Как видно, в рассматриваемом приближении значение интеграла содержит энергию (9.99), которая зависит только от числа n . Поэтому в (9.110) можно выполнить суммирование по моментам

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

Этот результат определяет кратность вырождения n -го уровня энергии. Учет также спин электрона $2s_e + 1 = 2$ (см. 8.4, правило 5). Величина $(2s_e + 1)n^2 = 2n^2$ называется статистическим весом изолированного атома водорода. Если использовать в качестве приближения формулу (9.110) не только для водородной плазмы, то вместо $2n^2$ следует ввести характерный для рассматриваемых атомов и ионов статистический вес. Используя в (9.110) все приведенные выше приближения и учитывая спин электрона, будем иметь

$$\frac{\beta \Delta \Omega_\kappa^{D(-)}}{V} = \zeta_a \zeta_e \lambda_e^2 \int_0^{e^2} \frac{de^2}{e^2} \sum_{n=1}^{n_0} n^2 e^{\beta I_n} \left[-2\beta I_n + 2Z_a \Gamma \beta I_n + Z_a \Gamma - \frac{3}{4} \beta I_n \Gamma (Z_a^2 + 1) \right].$$

Здесь опущены все члены $\sim \Gamma^2$ и введено более удобное обозначение $I_n = -E_n$, кроме того, в силу (9.73) положено $\lambda_{a,e} \simeq \lambda_e$. При интегрировании по e^2 удобно ввести, как и в предыдущем разделе переменную $e^2 \rightarrow e^2 g$ и учесть, что $I_n \rightarrow I_n g^2$ и $\Gamma \rightarrow \Gamma g^{3/2}$:

$$\begin{aligned} \frac{\beta \Delta \Omega_\kappa^{D(-)}}{V} &= \zeta_a \zeta_e \lambda_e^3 \sum_{n=1}^{n_0} n^2 \left\{ 1 - e^{\beta I_n} + \right. \\ &\left. + \frac{2}{3} Z_a \Gamma F\left(\frac{3}{4}; \frac{7}{4}; \beta I_n\right) + \frac{2}{7} \left[2Z_a - \frac{3}{4}(Z_a^2 + 1) \right] \beta I_n \Gamma F\left(\frac{7}{4}; \frac{11}{4}; \beta I_n\right) \right\}, \end{aligned} \quad (9.111)$$

где

$$F(a, a+1; z) = 2a \int_0^1 g^{2a-1} e^{zg^2} dg$$

- вырожденная гипергеометрическая функция [1]. Легко оценить расходимость суммы (9.111). Для этого формально устремим $\beta I_n = z$ к нулю и учтем, что $F(a; a+1; z) \rightarrow 1$ при $z \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{n_0} n^2 \left\{ 1 - e^z + \frac{2}{3} Z_a \Gamma F\left(\frac{3}{4}; \frac{7}{4}; z\right) + \frac{2}{7} \left[2Z_a - \frac{3}{4}(Z_a^2 + 1) \right] z \Gamma F\left(\frac{7}{4}; \frac{11}{4}; z\right) \right\} = \\ = \frac{2}{3} Z_a \Gamma \sum_{n=1}^{n_0} n^2 = \frac{1}{9} Z_a \Gamma n_0 (n_0 + 1) (2n_0 + 1). \end{aligned}$$

Таким образом, при $n_0 \rightarrow \infty$ сумма (9.111) стремится к бесконечности как n_0^3 . Но, если (9.111) объединить с (9.107), то результат при $n_0 \rightarrow \infty$ будет конечным. Для

этого числа n_0 и n_0^3 в (9.107) нужно записать в виде сумм

$$\sum_{n=1}^{n_0} 1 = n_0, \quad \sum_{n=1}^{n_0} n^2 = \frac{1}{6}n_0(n_0 + 1)(2n_0 + 1).$$

При достаточно больших n_0 второе равенство можно записать в приближенном виде

$$n_0^3 \simeq 3 \sum_{n=1}^{n_0} n^2.$$

Используя этот результат и первое равенство, представим (9.107) в виде суммы

$$I_{a,e}^{(-)} = -\frac{3}{4} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{Z_a^2 \beta R_y}} \sum_{n=1}^{n_0} \left\{ 1 - \frac{6}{7} Z_a \Gamma \left(1 - \frac{Z_a^2 + 1}{4Z_a} \right) - \frac{2}{3} \frac{Z_a \Gamma}{Z_a^2 \beta R_y} n^2 \right\}.$$

Подставим это выражение в формулу (9.95), образуя, таким образом, вклад в термодинамический потенциал от непрерывного спектра отрицательных энергий. Предварительно преобразуем коэффициент перед суммой, переходя в соответствии с формулой (9.94) к параметрам ζ_a, ζ_e :

$$-\frac{\beta \Delta \Omega_{\kappa}^{H(-)}}{V} = -\zeta_a \zeta_e \lambda_e^3 \sum_{n=1}^{n_0} \left\{ \left[1 - \frac{6}{7} Z_a \Gamma \left(1 - \frac{Z_a^2 + 1}{4Z_a} \right) \right] Z_a^2 \beta R_y - \frac{2}{3} Z_a \Gamma n^2 \right\}. \quad (9.112)$$

Произведем затем очевидную замену $Z_a^2 \beta R_y = n^2 \beta I_n$ и воспользуемся свойствами гипергеометрических функций [1]

$$F \left(\frac{7}{4}; \frac{11}{4}; \beta I_n \right) = e^{\beta I_n} F \left(1; \frac{11}{4}; -\beta I_n \right),$$

$$F \left(\frac{3}{4}; \frac{7}{4}; \beta I_n \right) = e^{\beta I_n} \left[1 - \frac{4}{7} \beta I_n F \left(1; \frac{11}{4}; -\beta I_n \right) \right].$$

Сложим выражения (9.111) и (9.112) и устремим n_0 к бесконечности. В результате получим вклад в термодинамический потенциал от всего отрицательного спектра энергии

$$-\frac{\beta \Delta \Omega_{ae}^{(-)}}{V} = \frac{1}{2} \zeta_a \zeta_e \lambda_e^3 \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{\beta I_n} (\omega_n - Z_a \Gamma \omega_n^{(a)}), \quad (9.113)$$

где

$$\omega_n = 1 - e^{-\beta I_n} - \beta I_n e^{-\beta I_n}, \quad (9.114)$$

$$\omega_n^{(a)} = \frac{2}{3} (1 - e^{-\beta I_n}) + \frac{4}{7} \beta I_n \left(\frac{1}{3} - \frac{3}{8} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \right) F \left(1; \frac{11}{4}; -\beta I_n \right) - \frac{3}{7} \beta I_n \left(2 - \frac{1}{2} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \right) e^{-\beta I_n}. \quad (9.115)$$

Здесь при переходе к предельной форме устраняется неопределенность в выборе числа n_0 . Точность предельного перехода определяется формулой (9.108) ($\sim 1/n_0$). Под знаком суммы в (9.113) вместо $2n^2$ введен произвольный статистический вес g_n , чтобы иметь возможность использовать формулу и для неводородной плазмы (например, плазма щелочных металлов).

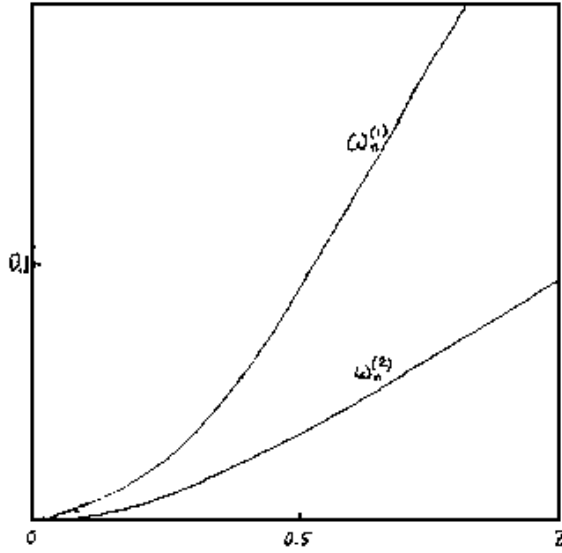


Рис. 9.2: Весовые множители статистической суммы (9.113): $\omega_n^{(1)}$ - статистический множитель Планка-Ларкина [20], $\omega_n^{(2)}$ - статистический множитель, учитывающий эффект экранировки [15], $z = \beta I_n$.

При этом для энергии уровней I_n надо брать экспериментальные или приближенно вычисленные значения. Весовой множитель (9.114) является известной формулой Планка-Ларкина [20]. Он появляется, если в разложении для термодинамического потенциала (9.93) учесть только три первых члена. Второй весовой множитель (9.115) возникает в следующем приближении, которое описывается двумя последними членами в (9.93) [15]. Присутствующий при $\omega_n^{(2)}$ в качестве множителя параметр Γ определяет влияние окружающих частиц на отрицательный спектр энергии электрона при взаимодействии его с ионом. При $\beta I_n \rightarrow 0$ оба множителя стремятся к нулю как $(\beta I_n)^2$ и n -ый член ряда (9.113) убывает как $1/n^2$. Если $\beta I_n \rightarrow \infty$, то функции (9.114) и (9.115) стремятся к асимптотам соответственно 1 и $1 - (3/8)(Z_a^2 +$

$1)/Z_a$. Для сравнения указанные функции при $Z_a = 1$ представлены на рис. 9.2.

9.5 Термодинамические функции плазмы

На основе результатов, полученных в предыдущих параграфах, запишем общую формулу для термодинамического потенциала (9.77), где зависимость от температуры и параметров ζ_a присутствует в явном виде. Кроме того, рассмотрим известные из термодинамики уравнения для плотностей заряженных частиц [18]

$$n_a = -\frac{\beta}{V} \zeta_a \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \zeta_a} \right)_{\beta, V} \quad (a = 1, 2, \dots). \quad (9.116)$$

Эти уравнения, совместно с уравнением для термодинамического потенциала, образуют замкнутую систему, позволяющую в параметрической форме вычислить любую термодинамическую функцию в зависимости от температуры и плотностей n_a , что и является конечной целью при построении термодинамики системы, пригодной для практического использования.

Рассмотрим в выражении (9.77) сумму термодинамических потенциалов по сортам частиц и выделим в ней электрон-ионные члены

$$\sum_{ab} \Delta \Omega_{ab} = \sum_{ab \neq e} \Delta \Omega_{ab} + 2 \sum_{a \neq e} \Delta \Omega_{ae} + \Delta \Omega_{ee}. \quad (9.117)$$

Для ионов воспользуемся представлением (9.95)

$$-\frac{\beta}{V} \sum_{a, b \neq e} \Delta \Omega_{ab} = \sum_{a, b \neq e} \frac{\kappa_a^2 \kappa_b^2}{12\pi \kappa} I_{ab}^+ = \frac{\kappa^3}{12\pi} \sum_{a, b \neq e} \nu_a \nu_b I_{ab}^+,$$

где $\nu_a = \kappa_a^2/\kappa^2$, а для I_{ab} имеется разложение (9.106). Для электрон-ионных потенциалов в соответствии с (9.92) имеем

$$\sum_{a \neq e} \Delta\Omega_{ae} = \sum_{a \neq e} (\Delta\Omega_{ae}^+ + \Delta\Omega_{ae}^-).$$

Здесь первый член под знаком суммы в правой части описывает вклад от положительного спектра энергий (9.106)

$$-\frac{\beta}{V} \sum_{a \neq e} \Delta\Omega_{ae}^+ = \frac{\kappa^3}{12\pi} \sum_{a \neq e} \nu_a \nu_e I_{ae}^+.$$

Второй член содержит сумму вкладов от непрерывного спектра отрицательных энергий (9.112) и дискретного спектра (9.111); этой сумме соответствует общая формула (9.113). В результате правую часть выражения (9.117) можно записать в виде

$$\begin{aligned} -\frac{\beta}{V} \sum_{a,b} \Delta\Omega_{ab} &= \frac{\kappa^3}{12\pi} \left\{ \sum_{a,b \neq e} \nu_a \nu_e I_{ae}^+ + 2 \sum_{a \neq e} \nu_a \nu_e I_{ae}^+ + \nu_e^2 I_{ee}^+ \right\} + \\ &+ 2 \frac{\beta}{V} \sum_{a \neq e} \Delta\Omega_{ae}^- = \frac{\kappa^3}{12\pi} \sum_{a,b} \nu_a \nu_b I_{ab}^+ + 2 \frac{\beta}{V} \sum_{a \neq e} \Delta\Omega_{ae}^-. \end{aligned} \quad (9.118)$$

В последнем равенстве первая сумма распространяется на все сорта частиц, включая и электроны. В первую сумму (9.118) подставим разложение (9.106) и произведем очевидные операции суммирования:

$$\begin{aligned} \sum_{a,b} \nu_a \nu_b I_{ab}^+ &= 1 + \Gamma \left[\frac{3}{8} \gamma_2 + \frac{1}{2} (2C - 2 + \ln 3\Gamma) \gamma_1^2 + \sigma_1 \gamma_1 \right] + \\ &+ \Gamma^2 \left[\frac{4}{9} (2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma) \gamma_2^2 + \frac{8}{9} \sigma_2 \gamma_2 + \frac{1}{4} (2C - \frac{11}{6} + \ln 3\Gamma) \gamma_1 \gamma_3 + \frac{1}{4} \gamma_1 \sigma_3 + \frac{1}{4} \sigma_1 \gamma_3 \right], \end{aligned} \quad (9.119)$$

где введены обозначения

$$\gamma_n = \sum_a \nu_a Z_a^n, \sigma_n = \sum_a \nu_a Z_a^n \ln |Z_a|, (n = 1, 2, 3) \quad (9.120)$$

Запишем теперь полное выражение для термодинамического потенциала (9.77) в развернутой форме. Для этого используем формулы (9.31), (9.76), (9.113) и (9.118), (9.119). Заметим при этом, что дебаевская классическая поправка (9.32) входит, как в кольцевое приближение (9.31), так и в формулу (9.119), полученную на основе лестничного приближения. Чтобы не учитывать ее дважды, сохраним в (9.31) лишь обменные члены. Тогда, объединяя все указанные результаты, будем иметь

$$-\frac{\beta\Omega}{V} = \sum_a \zeta_a + \frac{\kappa^3}{12\pi} (1 + f_p) + \sum_{a \neq e} \zeta_a \zeta_e \lambda_e^3 \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{\beta I_n} (\omega_n - Z_a \Gamma \omega_n^{(a)}), \quad (9.121)$$

где функция $f_p(\Gamma)$ характеризует поправку к дебаевскому члену:

$$f_p(\Gamma) = \Gamma \left[\frac{3}{8} \gamma_2 + \frac{1}{2} (2C - 2 + \ln 3\Gamma) \gamma_1^2 + \sigma_1 \gamma_1 \right] - \frac{3}{16} \frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}} \nu_e^2 \lambda_e \kappa +$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{3}{16}\nu_e(1-\nu_e)\lambda_e\kappa + \Gamma^2 \left[\frac{4}{9} \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) \gamma_2^2 + \frac{1}{4} \left(2C - \frac{11}{6} + \ln 3\Gamma \right) \gamma_1\gamma_3 + \right. \\
 & \left. + \frac{8}{9}\sigma_2\gamma_2 + \frac{1}{4}\gamma_1\sigma_3 - \frac{1}{6}\gamma_4 + \frac{1}{4}\gamma_3\sigma_1 + \frac{\alpha}{2}\gamma_1^2\gamma_2 \right]. \quad (9.122)
 \end{aligned}$$

Выражение (9.121) представляет собой разложение термодинамического потенциала плазмы по параметру ζ вплоть до членов порядка $\zeta^{5/2} \ln \zeta$ и $\zeta^{5/2}$ включительно. Это удалось проделать благодаря тому, что проблема учета коллективных и индивидуальных взаимодействий в плазме была сведена к квантовомеханической задаче эффективного взаимодействия двух тел. Поэтому результаты применимы либо для водородной плазмы, либо для двухкомпонентной плазмы, где присутствуют электроны и ядра (или водородоподобные ионы) с зарядом Z , которые могут образовать лишь одноэлектронную связанную систему.

Для многокомпонентной плазмы, где имеются ядра (ионы) с зарядами различных кратностей и могут возникать многоэлектронные связанные системы, подобный подход должен, очевидно, основываться на рассмотрении многочастичных эффективных взаимодействий. Такая задача практически неразрешима, поэтому ниже остановимся на наиболее простом, но практически важном случае водородоподобной плазмы, состоящей из однократно заряженных ионов и электронов ($a = i, e$).

В этом случае коэффициенты (9.122) равны $\gamma_1 = \gamma_3 = \nu_i - \nu_e$, $\gamma = 1$ и $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = 0$ и выражение (9.122) сводится к следующему

$$\begin{aligned}
 f_p(\Gamma) = & \Gamma \left[\frac{3}{8} + \frac{1}{2}(2C - 2 + \ln 3\Gamma)(\nu_i - \nu_e)^2 \right] - \frac{3}{16}\lambda_e\kappa\nu_e^2 - \frac{3}{16}\frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}}\lambda_e\kappa\nu_e^2 + \\
 & + \Gamma^2 \left[\frac{4}{9} \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) + \frac{1}{4} \left(2C - \frac{11}{6} + \ln 3\Gamma \right) (\nu_i - \nu_e)^2 - \frac{1}{6} + \frac{\alpha}{2}(\nu_i - \nu_e)^2 \right]. \quad (9.123)
 \end{aligned}$$

Для термодинамического потенциала (9.121) будем иметь

$$-\frac{\beta\Omega}{V} = \beta p = \zeta_i + \zeta_e + \frac{\kappa^3}{12\pi}(1 + f_p) + \zeta_i\zeta_e\lambda_e^3 \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{\beta I_n} (\omega_n - \Gamma\omega_n^{(i)}). \quad (9.124)$$

На основе формулы (9.116) для плотностей ионов и электронов получаются следующие выражения

$$\begin{aligned}
 n_i = & \zeta_i + \frac{\kappa^3}{8\pi}\nu_i \left\{ 1 + \Gamma \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{6}(\nu_i - \nu_e)^2 + (2C - 2 + \ln 3\Gamma) \left(\frac{2}{3}(\nu_i - \nu_e)^2 + \frac{4}{3}(\nu_i - \nu_e)\nu_e \right) \right] + \right. \\
 & + \Gamma^2 \left[-\frac{7}{54} + \frac{20}{27} \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) + \left(2C - \frac{11}{6} + \ln 3\Gamma \right) \left(\frac{5}{12}(\nu_i - \nu_e)^2 + \frac{2}{3}(\nu_i - \nu_e)\nu_e \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} + 5\alpha \right) (\nu_i - \nu_e)^2 + \frac{4}{3}\alpha(\nu_i - \nu_e)\nu_e \right] - \frac{1}{8}\lambda_e\kappa\nu_e \right\} + \zeta_i\zeta_e\lambda_e^3 \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{\beta I_n} \left[\omega_n - \Gamma \left(1 + \frac{1}{2}\nu_i \right) \omega_n^{(i)} \right] \quad (9.125)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 n_e = & \zeta_e + \frac{\kappa^3}{8\pi}\nu_e \left\{ 1 + \Gamma \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{6}(\nu_i - \nu_e)^2 + (2C - 2 + \ln 3\Gamma) \left(\frac{2}{3}(\nu_i - \nu_e)^2 - \frac{4}{3}(\nu_i - \nu_e)\nu_i \right) \right] + \right. \\
 & + \Gamma^2 \left[-\frac{7}{54} + \frac{20}{27} \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) + \left(2C - \frac{11}{6} + \ln 3\Gamma \right) \left(\frac{5}{12}(\nu_i - \nu_e)^2 - \frac{2}{3}(\nu_i - \nu_e)\nu_i \right) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} + 5\alpha \right) (\nu_i - \nu_e)^2 - \frac{4}{3} \alpha (\nu_i - \nu_e) \nu_i \left] - \frac{1}{8} \lambda_e \kappa \nu_i - \frac{1}{4} \frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}} \lambda_e \kappa \nu_e \right\} + \\
 & + \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{\beta I_n} \left[\omega_n - \Gamma \left(1 + \frac{1}{2} \nu_e \right) \omega_n^{(i)} \right]. \quad (9.126)
 \end{aligned}$$

Если воспользоваться условием электронейтральности плазмы $n_i = n_e$, то получается связь между величинами ν_i и ν_e . Последние были определены как $\nu_i = \kappa_i^2 / \kappa^2$, $\nu_e = \kappa_e^2 / \kappa^2$, где $\kappa_i, \kappa_e, \kappa$, в свою очередь, определяются формулами (9.17) и (9.18). Учитывая эти определения, можно записать $\zeta_i - \zeta_e = (\kappa^3 / 4\pi\Gamma)(\nu_i - \nu_e)$ и получить из выражений (9.125), (9.126) уравнение $n_i - n_e = 0$:

$$\begin{aligned}
 & (\nu_i - \nu_e) \left\{ 2 + \Gamma + \Gamma^2 \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{6} (\nu_i - \nu_e)^2 + (2C - 2 + \ln 3\Gamma) \left(\frac{2}{3} (\nu_i - \nu_e)^2 + \frac{8}{3} \nu_i \nu_e \right) \right] + \right. \\
 & + \Gamma^3 \left[-\frac{7}{54} + \frac{20}{27} \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) + \left(2C - \frac{11}{6} + \ln 3\Gamma \right) \left(\frac{5}{12} (\nu_i - \nu_e)^2 + \frac{4}{3} \nu_i \nu_e \right) + \right. \\
 & \left. \left. + \frac{1}{6} \left(\frac{1}{2} + 5\alpha \right) (\nu_i - \nu_e)^2 + \frac{8}{3} \alpha \nu_i \nu_e \right] - \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 \sum_{n=1}^{\infty} g_n e^{\beta I_n} \Gamma \omega_n^{(i)} \right\} + \frac{1 + \ln 2}{4\sqrt{2}} \lambda_e \kappa \Gamma \nu_e^2 = 0.
 \end{aligned}$$

Будем считать $\nu_i - \nu_e$ малой величиной и опустим в этом уравнении все величины, содержащие $(\nu_i - \nu_e)^2$. Решая затем уравнение относительно величины $\nu_i - \nu_e$ и ограничиваясь членами порядка $\lambda_e \kappa \Gamma$, будем иметь

$$\nu_i = \nu_e \left(1 - \frac{1 + \ln 2}{8\sqrt{2}} \lambda_e \kappa \Gamma \right) \text{ или } \zeta_i = \zeta_e \left(1 - \frac{1 + \ln 2}{8\sqrt{2}} \lambda_e \kappa \Gamma \right). \quad (9.127)$$

Оценим здесь величину второго члена в скобках. Положим $T = 10^4$ K и $n_e = 10^{19}$ см⁻³. Этим условиям соответствует плазма с сильным взаимодействием между заряженными частицами, когда $\Gamma \geq 1$ и $(1 + \ln 2) / 8\sqrt{2} \lambda_e \kappa \Gamma \simeq 0,04$.

Очевидно, что величина $(\nu_i - \nu_e)^2$ пропорциональна квадрату этого параметра и им можно пренебречь даже в случае существенно неидеальной плазмы.

Введем новые обозначения

$$Q = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \exp(-\beta \Delta E_n) \omega_n(x), \quad (9.128)$$

$$\varphi = \frac{1}{Q} \sum_{n=1}^{\infty} g_n \exp(-\beta \Delta E_n) \omega_n^{(i)}(x), \quad (9.129)$$

где Q - вклад в термодинамический потенциал от дискретного спектра в форме Планка-Ларкина (будем называть его статистической суммой), φ - функция, являющаяся поправкой к статистической сумме, $x = \beta I_n = \beta I - \beta \Delta E_n$, I - потенциал ионизации, ΔE_n - энергия возбуждения n -го уровня.

Опуская в формулах (9.123)-(9.126) члены $\sim (\nu_i - \nu_e)^2$ и используя обозначения (9.128), (9.129), запишем

$$-\frac{\beta \Omega}{V} = \beta p = (\zeta_i + \zeta_e) \left[1 + \frac{\Gamma}{3} (1 + f_p) \right] + \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 Q (1 - \Gamma \varphi) e^{\beta I}, \quad (9.130)$$

$$n_i = n_e = \frac{1}{2} (\zeta_i + \zeta_e) \left[1 + \frac{\Gamma}{2} (1 + f_n) \right] + \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 Q \left(1 - \frac{5}{4} \Gamma \varphi \right) e^{\beta I}, \quad (9.131)$$

$$f_p = \frac{3}{8}\Gamma + \frac{4}{9}\Gamma^2 \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) - \frac{1}{6}\Gamma^2 - \frac{3}{16}\lambda_e \kappa \nu_i \nu_e - \frac{3}{16} \frac{1 + \ln 2}{\sqrt{2}} \lambda_e \kappa \nu_e^2 \quad (9.132)$$

$$f_n = \frac{\Gamma}{2} + \Gamma^2 \left[\frac{20}{27} \left(2C - \frac{35}{12} + \ln 4\Gamma \right) - \frac{7}{54} \right] - \frac{1}{8}\lambda_e \kappa \nu_e. \quad (9.133)$$

Функции f_p и f_n характеризуют отклонение полученных результатов от дебаевской поправки (9.32). Графики указанных функций представлены на рис. 9.3. Как видно, при $\Gamma < 1$ вклад в термодинамический потенциал получается несколько меньше де-

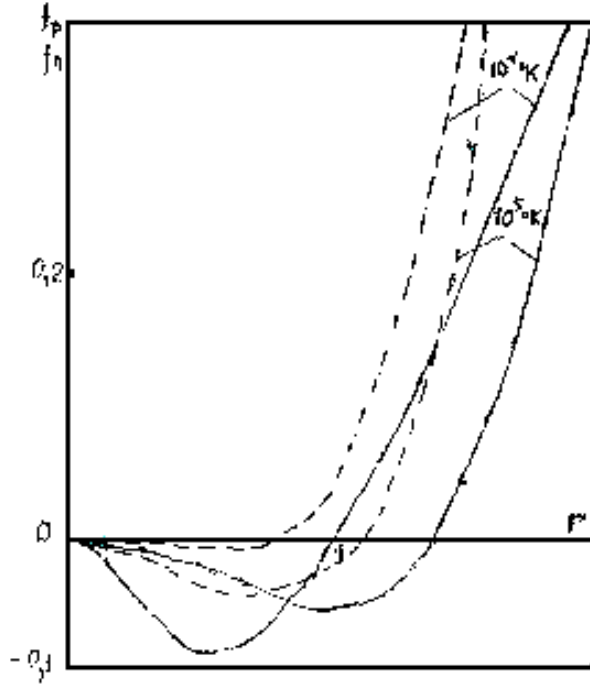


Рис. 9.3: Функции, характеризующие отклонение от дебаевской поправки к термодинамическому потенциалу в зависимости от параметра Γ и температуры. Сплошные кривые соответствуют f_p , пунктирные — f_n .

Найдем выражение для внутренней энергии E , которое потребуется ниже для сравнения теоретических и экспериментальных данных. Для этого воспользуемся формулами (9.130), (9.131) и известным термодинамическим соотношением [18]

$$\frac{\beta E}{V} = \frac{\beta}{V} \left(\frac{\partial \beta \Omega}{\partial \beta} \right)_{V, \zeta_i, \zeta_e} - \frac{3}{2} \frac{1}{V} \sum_{a=i, e} \zeta_a \left(\frac{\partial \beta \Omega}{\partial \zeta_a} \right)_{\beta, V}.$$

Если E отсчитывать от энергии основного состояния иона, то сюда нужно добавить величину $n_i I$. В результате будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{\beta E}{V} = & \frac{1}{2}(\zeta_i + \zeta_e)(3 + \beta I) + \frac{1}{4}(\zeta_i + \zeta_e)\Gamma [1 + 4f_p - 3f_n + \beta I(1 + f_n)] + \\ & + \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 Q e^{\beta I} \left[\frac{3}{2} - \beta \frac{\partial \ln Q}{\partial \beta} + \Gamma \varphi \left(\beta \frac{\partial \ln \varphi Q}{\partial \beta} - \frac{3}{4} - \frac{1}{4}\beta I \right) \right]. \end{aligned} \quad (9.134)$$

баевского, а при $\Gamma > 1$ начинает возрастать. Но последний случай следует рассматривать как выход за строгие рамки применимости теории, и если экстраполировать результаты в эту область, то разумность такого шага должна не противоречить физическому смыслу и подтверждаться экспериментальными данными. Функция (9.129) учитывает вклад порядка $\zeta^{5/2}$ в термодинамический потенциал от отрицательного спектра энергии и играет существенную роль. Например, при $T \sim 10^{40} K$ для водородной плазмы $\varphi \sim 0,2$, а для водородоподобной цезиевой плазмы $\varphi \sim 0,3$. Таким образом, при $\Gamma \leq 1$ взаимодействие заряженных частиц описывается для положительного спектра энергии в основном поправкой Дебая-Хюккеля (9.32), а для отрицательного спектра энергии следует учитывать функцию φ .

Формулы (9.128)-(9.134) могут быть использованы для расчетов термодинамических свойств плазмы в довольно широком диапазоне изменения температуры и давления.

Описанные в части ?? методы генерации и диагностики неидеальной плазмы позволяют провести сравнение экспериментальных данных с теоретическими расчетами термодинамических функций в широком диапазоне давлений и температур. Для сравнения теории, изложенной в настоящем разделе на рис.9.4 представлено калорическое уравнение состояния плазмы цезия (энтальпия H в зависимости от давления p при удельном объеме $V = 200 \text{ см}^3/\text{г}$), полученное на подогреваемой ударной трубе и результаты расчетов, выполненных по формулам (9.130)-(9.134) на основе методики, развитой в [8]. Для сравнения здесь представлены также кривая, полученная при $f_p, f_n, \varphi = 0$ (учитывалась только поправка Дебая-Хюккеля (9.32) и статистическая сумма в форме Планка-Ларкина (9.128)) и кривая, подсчитанная по формулам идеального газа со статистической суммой равной 2.

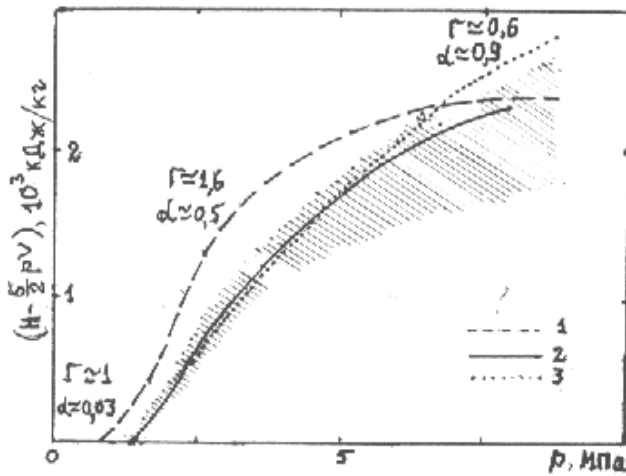


Рис. 9.4: Калорическое уравнение состояния плазмы цезия ($V = 200 \text{ см}^3/\text{г}$); отмечены значения параметра Γ и степени ионизации α ; заштрихована полоса ($\pm 5\%$) для сглаженной экспериментальной зависимости $H(p, V)$: 1 - дебаевское приближение (9.32) и (9.128); 2 - результаты расчетов по формулам (9.130) - (9.134); 3 - приближение идеальной плазмы с $Q = 2$.

Основной вывод, следующий из сравнения экспериментальных данных, представленных на рис.9.4, заключается в том, что теория качественно правильно соответствует экспериментальным данным. Вместе с тем имеющиеся количественные расхождения теории с экспериментом зависят в значительной мере от корректности учета связанных и свободных состояний в рамках единого подхода (см. рис.9.1). Другими словами, как и в случае нейтральных газов, проблема заключается в правильном учете отталкивания частиц на малых расстояниях и притяжения на больших расстояниях.

Хорошее совпадение с экспериментом расчетов в приближении идеального газа и по формулам (9.130)-(9.134) в области сильной неидеальности ($\Gamma \sim 1, 6$) не случайно. Анализ, проведенный в части 2, показывает, что учет отталкивания, описываемого функцией (9.129), фактически компенсирует вклад в термодинамический потенциал от непрерывного спектра.

9.6 Основы химической модели плазмы

Для вычисления термодинамических функций высокотемпературных сред используются обычно два подхода, получившие название химической и физической моделей

[30]. В большинстве случаев рассматривается более простая химическая модель, где заранее предполагается наличие частиц определенных сортов, имеющих непрерывный спектр энергий. Влияние внутренних степеней свободы (связанных состояний) на термодинамические функции учитывается статистическими суммами частиц. Это является источником известных трудностей, связанных с условностью разделения степеней свободы системы на поступательные и внутренние. В практике расчетов термодинамических величин эти трудности обходятся путем различного рода ограничения статистических сумм на основе тех или иных физических соображений. Последовательный, но более сложный подход к определению термодинамических функций основан на физической модели, где рассматриваются ядра и электроны, а кулоновское взаимодействие между ними учитывается на основе квантовой и статистической теории. При этом вклады в термодинамические функции от непрерывного и дискретного спектров возникают одновременно и являются конечными. При обсуждении качественного поведения термодинамических характеристик плазмы сложного состава удобнее пользоваться традиционной химической моделью. Влияние внутренней структуры частиц (связанных состояний) на термодинамические функции учитывается введением статистических сумм для изолированных частиц. Последнее предположение является источником известных трудностей, связанных с расходимостью указанных сумм. В практике расчетов термодинамических функций расходимости ликвидируются на основе качественных физических соображений, связанных с наличием окружающих частиц [15], [28].

Все теоретические результаты, представленные выше, были получены на основе физической модели, где рассматриваются ядра и электроны, а взаимодействие между ними учитывается на основе квантостатистической теории. При этом вклады в термодинамические функции от непрерывного и дискретного спектров возникают одновременно и приводят к конечным результатам.

В этом разделе мы рассмотрим задачу о переходе от физической модели плазмы к химической. Такой переход не будет сопряжен с дополнительными предположениями, связанными с физической моделью, и сводится к записи термодинамических величин в терминах, принятых в химической модели.

Как и в предыдущем разделе рассмотрим наиболее простой случай двухкомпонентной плазмы, состоящей из однократно заряженных водородоподобных ионов и электронов, и выделим в соответствующих формулах плотность и химический потенциал "атомов". Иными словами, от двухкомпонентной плазмы в физической модели перейдем к трехкомпонентной плазме в химической модели.

Для этой цели воспользуемся формулами (9.127)-(9.131) и введем здесь понятия чисел атомов n_o , ионов n_i и электронов n_e , которые используются в химической модели. Плотности ионов и электронов в физической модели, определяемых соотношением (9.131), во избежание путаницы обозначим соответственно через n_i^* и n_e^* .

Очевидно, что число ионов (ядер) должно сохраняться при переходе от одной модели к другой: $n_i^* = n_i + n_o$. Тогда из (9.131) следует

$$n_i^* = n_i + n_o = \frac{1}{2}(\zeta_i + \zeta_e) \left[1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n) \right] + \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 Q \left(1 - \frac{5}{4} \Gamma \varphi \right) e^{\beta I}.$$

Задача заключается в том, чтобы выделить в правой части этого выражения члены соответствующие свободным заряженным частицам n_i, n_e и частицам связанным в атомы n_o . Поскольку здесь первый член учитывает вклад от положительного спектра

энергии, а второй описывает связанные состояния, то можно предположить

$$n_i = n_e = \frac{1}{2}(\zeta_i + \zeta_e) \left[1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n) \right], \quad n_o = \zeta_i \zeta_e \lambda_e^3 Q \left(1 - \frac{5}{4}\Gamma\varphi \right) e^{\beta I}. \quad (9.135)$$

При таком разделении соблюдаются асимптотические пределы для исходного холодного газа, т.е. $n_i^* + n_e^* \rightarrow n_o$ при $\beta \rightarrow \infty$, и полностью ионизованной высокотемпературной идеальной плазмы $n_i^* + n_e^* \rightarrow n_i + n_e$ при $\beta \rightarrow 0$. Используя первое равенство (9.135) и связь между величинами ζ_i, ζ_e , описываемую второй формулой (9.127), исключим из второго равенства (9.135) произведение $\zeta_i \zeta_e$ и, опуская при этом члены порядка $(\lambda_e \kappa \Gamma)^2$, получим

$$\frac{n_i n_e}{n_o} = \frac{\left[1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n) \right]^2 \lambda_e^{-3}}{1 - \frac{5}{4}\Gamma\varphi} \frac{1}{Q} e^{-\beta I}. \quad (9.136)$$

Это уравнение можно рассматривать как следствие известного закона действующих масс [18]:

$$\mu_i + \mu_e = \mu_o.$$

Если связь между химическими потенциалами и плотностями частиц записать в традиционной форме

$$\mu_i = \frac{1}{\beta} \ln \frac{n_i \lambda_i^3}{1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n)}, \quad \mu_e = \frac{1}{\beta} \ln \frac{n_e \lambda_e^3}{1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n)}, \quad \mu_o = \frac{1}{\beta} \ln \frac{n_o \lambda_o^3 e^{-\beta I}}{Q \left(1 - \frac{5}{4}\Gamma\varphi \right)}.$$

Если в формуле (9.136) положить $\Gamma, \varphi = 0$, то получается известное уравнение Саха для идеальной частично ионизованной плазмы.

Уравнение (9.136) описывает неидеальную плазму. Величины, характеризующие взаимодействие, интерпретируют обычно, как "снижение потенциала ионизации". Для этого при достаточно малых Γ и φ с той же точностью можно представить

$$1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n) \simeq \exp \left[\frac{\Gamma}{2}(1 + f_n) \right], \quad 1 - \frac{5}{4}\Gamma\varphi \simeq \exp \left(-\frac{5}{4}\Gamma\varphi \right)$$

и записать выражение (9.136) в виде

$$\frac{n_i n_e}{n_o} = \frac{1}{Q} \lambda_e^{-3} \exp[-\beta(I - \Delta I)], \quad (9.137)$$

где величина

$$\Delta I = \frac{1}{\beta}\Gamma + \frac{\Gamma}{\beta}f_n + \frac{1}{\beta}\frac{5}{4}\Gamma\varphi \quad (9.138)$$

называется "снижением потенциала ионизации".

Первый член в правой части (9.138) является снижением потенциала ионизации, возникающим из-за дебаевской поправки, второй член является поправкой к дебаевскому члену и, наконец, третий член соответствует снижению потенциала ионизации за счет влияния на связанные электрон-ионные пары окружающих частиц.

Правая часть уравнения (9.137) называется в химической модели константой равновесия:

$$K = \frac{1}{Q} \lambda_e^{-3} \exp[-\beta(I - \Delta I)]. \quad (9.139)$$

В химической модели также используется понятие степени ионизации α , которая определяется как отношение плотности числа ионов n_i к начальной плотности числа атомов $n_a = n_i + n_o$. Если начальная плотность атомов задана, то из (9.137) и (9.139) следует

$$n_i^2 = K(n_a - n_i) \text{ или } \left(\frac{n_i}{n_o}\right)^2 + \frac{K}{n_a} \frac{n_i}{n_a} - \frac{K}{n_a} = 0.$$

Степень ионизации есть положительный корень этого уравнения

$$\alpha = \frac{n_i}{n_a} = -\frac{1}{2} \frac{K}{n_a} + \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{K}{n_a}\right)^2 + \frac{K}{n_a}}. \quad (9.140)$$

Запишем теперь в терминах химической модели уравнения (9.130) и (9.134). Используя определения (9.135), будем иметь

$$-\frac{\beta\Omega}{V} = \beta p = (n_i + n_e) \frac{1 + \frac{\Gamma}{3}(1 + f_p)}{1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n)} + n_o \frac{1 - \Gamma\varphi}{1 - \frac{5}{4}\Gamma\varphi}, \quad (9.141)$$

$$\begin{aligned} \frac{\beta E}{V} = & \frac{1}{2}(n_i + n_e) \frac{3 + \beta I}{1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n)} + \frac{1}{4}(n_i + n_e) \frac{\Gamma}{1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n)} [1 + 4f_p - 3f_n + \beta I(1 + f_n)] + \\ & + n_o \frac{1}{1 - \frac{5}{4}\Gamma\varphi} \left[\frac{3}{2} - \beta \frac{d \ln Q}{d\beta} + \Gamma\varphi \left(\beta \frac{d \ln \varphi Q}{d\beta} - \frac{3}{4} - \frac{1}{4}\beta I \right) \right]. \end{aligned} \quad (9.142)$$

Чтобы в уравнениях (9.136), (9.141), (9.142) полностью перейти к переменным n_i , n_e , n_o , β , которые являются базовыми в малом каноническом ансамбле и химической модели, нужно определить связь между параметром взаимодействия Γ , выраженным через активности, и аналогичным параметром, выраженным через плотности заряженных частиц

$$\gamma = \beta e^2 [4\pi\beta e^2 (n_i + n_e)]^{1/2}. \quad (9.143)$$

Эта связь получается, если воспользоваться первой формулой (9.135) и определениями (9.17), (9.18), (9.33):

$$\gamma = \Gamma \sqrt{1 + \frac{\Gamma}{2}(1 + f_n)}. \quad (9.144)$$

Отметим, что термодинамические формулы (9.130), (9.131), (9.134), описывающие физическую модель, и формулы (9.135), (9.136), (9.141), (9.144) для химической модели эквивалентны, поскольку переход от одних к другим совершен без дополнительных упрощений.

Для расчета термодинамических свойств слабонеидеальной плазмы используется обычно химическая модель, построенная на основе малого канонического ансамбля в виде разложений термодинамических функций по плотности частиц (или, что то же самое, по параметру (9.143)) [15], [28]. Основную роль здесь играет свободная энергия $F(N, V, T)$, зная которую, можно найти любую термодинамическую величину. Вклад от дискретного спектра рассчитывается независимо от вклада непрерывного спектра энергии. При этом возникает проблема сходимости статистических сумм атомов, которая решается либо применением формулы Планка-Ларкина (9.128), либо "обрезанием" членов ряда на основе тех или иных физических соображений [15], [28].

Для определения вклада в свободную энергию от кулоновского взаимодействия свободных частиц используется поправка Дебая-Хюккеля [18]. Термодинамика функции для этого случая можно получить из формул (9.137), (9.138), (9.141), (9.142), (9.144), если в последних положить $\varphi = 0$ и $\Gamma \simeq \gamma \ll 1$. Таким образом, ограничиваясь членами порядка γ , будем иметь

$$\beta p = n_o + n_i + n_e - (n_i + n_e) \frac{\gamma}{6}$$

$$\frac{\beta E}{V} = \frac{3}{2}(n_o + n_i + n_e) - (n_i + n_e) \frac{1}{2} \gamma - n_o \beta \frac{d \ln Q}{d \beta} + n_i \beta I \quad (9.145)$$

$$\frac{n_i n_e}{n_o} = \frac{1}{Q} \lambda_e^{-3} \exp[-\beta(I - \Delta I)], \quad \Delta I = \frac{1}{\beta} \gamma.$$

Как следует из (9.144), параметр γ мало отличается от Γ , если $\Gamma \leq 0,5$, т.е. можно считать, что химическая и физическая модели дают одинаковые результаты при достаточно малых значениях параметров взаимодействия. Если $\Gamma > 1$, то различие между рассматриваемыми моделями может быть не только существенным, но и принципиальным.

Рассмотрим экстраполяционные свойства обеих моделей при значениях γ и Γ больше единицы [9]. На графиках рис. 9.5 представлены результаты расчетов по формулам (9.145), где для массовой плотности ρ взят масштаб $\ln \rho$, а для давления $sign(p) \ln(|p| + 1)$. Как видно, приближение (9.145) для сильно сжатой плазмы (большие ρ) не применимо, поскольку область отрицательного давления на рис. 9.5(б) не имеет физического смысла. Но вертикальную прямую, характеризующую падение давления, можно рассматривать как границу, до которой возможно экстраполировать теорию, т.е. границу устойчивости, где применимы формулы (9.145). Степень ионизации с увеличением плотности падает у этой границы до нуля (рис. 9.5(а)).

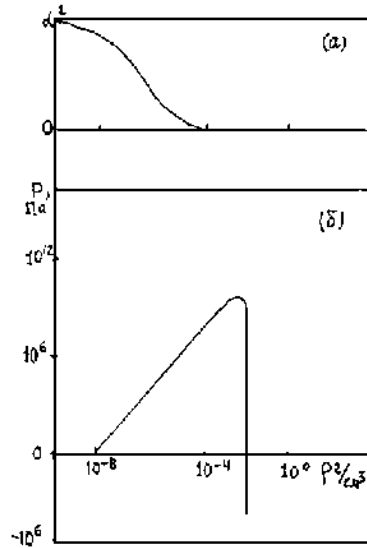


Рис. 9.5: Изотерма $T = 2 \cdot 10^4 K$ водородной плазмы для химической модели в малом каноническом ансамбле, (а), α - степень ионизации, (б), p - давление, ρ - массовая плотность [9]

Графики на рис. 9.6(а) и (б) построены по формулам (9.136), (9.140) и (9.144). Они также описывают изменение степени ионизации и давления в зависимости от плотности. Как видно, изотермы расположены в положительной области изменения параметров. Свободная энергия $F(N, V, \beta)$ вдоль изотерм является выпуклой функцией и поэтому для всякого V существует единственное состояние равновесия. Проекция изотермы на (ρ, p) плоскость, т.е. уравнение состояния, имеет в логарифмических координатах перегиб. При убывании T зона минимума свободных электронов расширяется, причем их число N_e становится исчезающе мало (до 10^{-10} от полного).

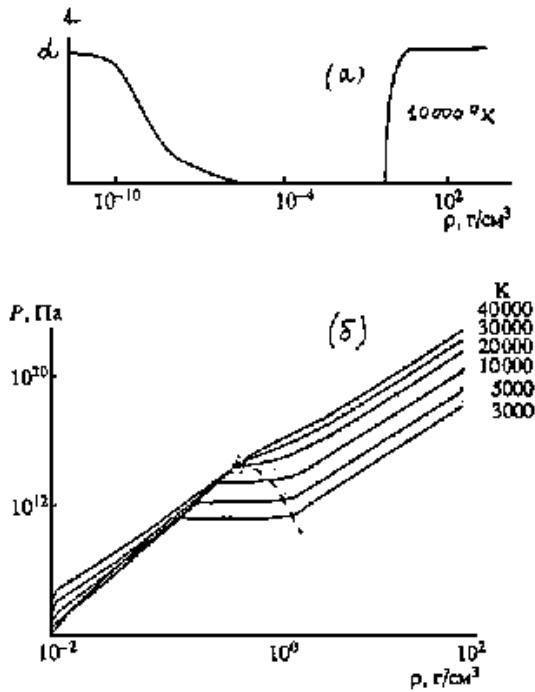


Рис. 9.6: Изотермы для водородной плазмы, построенные по формулам (9.136), (9.141), (9.144) [9]. (Обозначения те же, что и на рис. 9.5).

Логарифмический график $p(\rho)$ приобретает, в свою очередь, почти постоянную зону (перепад давления не превышает величины 10^{-3}), локализованную в зоне роста N_e . На рис. 9.6(б) изображено разбиение плоскости (ρ, p) изотермами и отмечена точка исчезновения заметного перегиба ($p = 0,6 \text{ г/см}^3, p = 4 \cdot 10^{12} \text{ Па}, T = 20000 \text{ К}$), которую можно трактовать как критическую. Пунктиром очерчена область, заполненная полными участками изотерм. Это также можно трактовать как наличие фазового перехода, при котором при пересечении узкой окрестности линии квазистационарного давления в плоскости (p, T) термодинамический потенциал изменяется резко, почти скачком. Этот модельный переход можно назвать конденсацией электронов, т.е. образованием связанных электрон-ионных пар (атомов водорода) при сжатии. Этот эффект отражен на графике рис. 9.6(а), где в средней области степень ионизации α почти нулевая.

Слева и справа от этой области α достигает единицы. Слева - обычная термическая ионизация - справа ее причиной является очень большое давление, при котором атомы водорода разрушаются на электроны и ионы. Интересно отметить, что параметры найденной критической точки реализуются в глубинных слоях Юпитера.

Рассмотрим в заключение эффект, связанный с совпадением в широком диапазоне параметров результатов расчетов по теории (9.130)-(9.134) и приближения идеальной плазмы (9.4). Для оценок воспользуемся формулами (9.141) и (9.135), где пренебрежем функциями f_p и f_n , а также произведем разложение в степенной ряд по величине $\varphi\Gamma$. Опуская члены порядка $(\varphi\Gamma)^2$, будем иметь

$$\beta p - (n_o + n_i + n_e) \simeq \frac{1}{4}\Gamma\varphi n_o - \frac{1}{6}\Gamma(n_i + n_e).$$

Как видно, неидеальные члены в правой части этого равенства имеют разные знаки и частично компенсируются. Таким образом, экспериментальный эффект "идеальности" неидеальной плазмы объясняется ролью взаимодействия в отрицательном спектре, сдвигом уровней энергии, в результате чего происходит компенсация вкладов в уравнение состояния от отрицательного и положительного спектров энергий.

9.7 Приложение. Вычисление некоторых интегралов

А. Взаимодействие одинаково заряженных частиц.

Рассмотрим интеграл (9.96):

$$I_{ab} = \frac{3}{Z_a Z_b \Gamma} \int_0^1 dg \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma g^{3/2} (Z_a^2 + Z_b^2) \right] \int_0^\infty t dt \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{Z_a Z_b \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} \right) \right\} e^{-g^{1/2} t} \quad (9.146)$$

Вычислим его приближенно в виде разложения по параметру Γ . Для этого воспользуемся теорией возмущений, считая возмущением разность между кулоновским и дебаевским потенциалами

$$\beta \Delta \Phi_{ab} = \frac{Z_a Z_b \Gamma g}{t} (1 - e^{-g^{1/2} t}) \quad (9.147)$$

Как видно, при $t \rightarrow 0$ это выражение стремится к $Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}$, при $t \rightarrow \infty$ - к нулю. Введем новую переменную $\xi = (Z_a Z_b \Gamma g)^{-1} t$ и, учитывая (9.147) представим экспоненту в подынтегральном выражении (9.146) в виде

$$\exp \left(-\frac{Z_a Z_b \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} \right) = \exp \left[-\frac{1}{\xi} + \frac{1}{\xi} (1 - e^{-\gamma \xi}) \right],$$

где обозначено $\gamma = Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}$. Второе слагаемое в показателе экспоненты является возмущением (9.147), по которому можно разложить соответствующую экспоненту в ряд Тейлора

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{1}{\xi} + \frac{1}{\xi} (1 - e^{-\gamma \xi}) \right] &= e^{-\frac{1}{\xi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \xi^{-n} (1 - e^{-\gamma \xi})^n = \\ &= e^{-\frac{1}{\xi}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{n!} C_n^m \xi^{-n} \exp(-m\gamma \xi) \end{aligned} \quad (9.148)$$

Последнее выражение получено из предыдущего путем использования формулы Ньютона для бинома $(1 - e^{-\gamma \xi})^n$, где $C_n^m = m!/n!(n-m)!$. Интеграл (9.146), с учетом указанной замены переменной интегрирования и использования разложения (9.148), имеет вид

$$\begin{aligned} I_{ab} &= 3 Z_a Z_b \Gamma \int_0^1 g^2 dg \left[1 + \frac{3}{8} \gamma \left(\frac{Z_a}{Z_b} + \frac{Z_b}{Z_a} \right) \right] \cdot \\ &\cdot \left\{ \frac{1}{\gamma^2} - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{n!} C_n^m \int_0^\infty e^{-\frac{1}{\xi}} \xi^{-n+1} \exp[-(1+m)\gamma \xi] d\xi \right\} \end{aligned} \quad (9.149)$$

Введем обозначение для выражения в фигурных скобках

$$S = \frac{1}{\gamma^2} - \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \frac{(-1)^m}{n!} C_n^m \int_0^\infty e^{-\frac{1}{\xi}} \xi^{-n+1} \exp[-(1+m)\gamma \xi] d\xi \quad (9.150)$$

Здесь интеграл по переменной ξ выражается через функцию Макдональда [1]

$$\int_0^\infty e^{-\frac{1}{\xi}} \xi^{-n+1} \exp[-(1+m)\gamma \xi] d\xi = 2[(1+m)\gamma]^{\frac{n}{2}-1} K_{2-n} \left(2\sqrt{(1+m)\gamma} \right)$$

Чтобы для термодинамического потенциала (9.95) получить разложение вида (9.93), нужно в сумме (9.150) учесть пять членов ($n = 0, 1, 2, 3, 4,$)

$$S \simeq \frac{1}{\gamma^2} - \frac{2}{\gamma} K_2(2\sqrt{\gamma}) - \frac{2}{\sqrt{\gamma}} K_1(2\sqrt{\gamma}) + \frac{2}{\sqrt{2\gamma}} K_1(2\sqrt{2\gamma}) - K_0(2\sqrt{\gamma}) + 2K_0(2\sqrt{2\gamma}) - K_0(2\sqrt{3\gamma}) - \\ - \frac{1}{3} \sqrt{\gamma} K_1(2\sqrt{\gamma}) + \sqrt{2\gamma} K_1(2\sqrt{2\gamma}) - \sqrt{3\gamma} K_1(2\sqrt{3\gamma}) + \frac{1}{3} \sqrt{4\gamma} K_1(2\sqrt{4\gamma}) - \\ - \frac{1}{12} \gamma K_2(2\sqrt{\gamma}) + \frac{1}{3} 2\gamma K_2(2\sqrt{2\gamma}) - \frac{1}{2} 3\gamma K_2(2\sqrt{3\gamma}) + \frac{1}{3} 4\gamma K_2(2\sqrt{4\gamma}) - \frac{1}{12} 5\gamma K_2(2\sqrt{5\gamma})$$

При написании этой суммы использовалось свойство функций Макдональда $K_{-\nu}(z) = K_{\nu}(z)$. Далее каждую функцию нужно представить в виде ряда [1] и ограничиться членами, содержащими отрицательные степени γ , а также учесть члены порядка $\ln \gamma, \gamma \ln \gamma$ и γ . В результате, после сокращения подобных членов будем иметь

$$S = \frac{1}{2\gamma} + \frac{1}{2} \left(2C + \ln 3\gamma - \frac{3}{2} \right) + \frac{2}{3} \left(2C + \ln 4\gamma - \frac{31}{12} \right),$$

где $C = 0,5772$ - постоянная Эйлера. Произведем в подынтегральном выражении (9.149) умножение и опустим члены порядка $\gamma^2 \ln \gamma$ и γ^2

$$\left[1 + \frac{3}{8} \Gamma g^{3/2} (Z_a^2 + Z_b^2) \right] \cdot S \simeq \frac{1}{2Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}} + \frac{3}{16} \left(\frac{Z_a}{Z_b} + \frac{Z_b}{Z_a} \right) + \\ + \frac{1}{2} \left[2C + \ln(3Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}) - \frac{3}{2} \right] + \frac{2}{3} 3Z_a Z_b \Gamma g^{3/2} \left[2C + \ln(4Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}) - \frac{31}{12} + \right. \\ \left. + \frac{9}{32} \left(\frac{Z_a}{Z_b} + \frac{Z_b}{Z_a} \right) \left(2C - \frac{3}{2} \ln(3Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}) \right) \right]$$

Здесь мы воспользовались прежним обозначением $\gamma = Z_a Z_b \Gamma g^{3/2}$. Интегрируя это выражение по зарядовой переменной g , окончательно получим

$$I_{ab} = 1 + \frac{3}{16} \Gamma (Z_a^2 + Z_b^2) + \frac{1}{2} Z_a Z_b \Gamma (2C + \ln(3Z_a Z_b \Gamma) - 2) + \\ + \frac{4}{9} (Z_a Z_b \Gamma)^2 \left(2C + \ln(4Z_a Z_b \Gamma) - \frac{35}{12} \right) + \frac{1}{8} Z_a Z_b (Z_a^2 + Z_b^2) \Gamma^2 \left(2C + \ln(3Z_a Z_b \Gamma) - \frac{11}{6} \right) \quad (9.151)$$

В. Взаимодействие частиц с зарядами разных знаков

Рассмотрим интегралы в выражении (9.97):

$$I_{ae}(\Gamma, t_0) = \frac{3}{Z_a \Gamma} \int_0^1 dg \left[1 + \frac{3}{8} \Gamma g^{3/2} (Z_a^2 + 1) \right] \left\{ \int_{t_0}^{\infty} t dt \left[\exp \left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} \right) - 1 \right] e^{-g^{1/2} t} + \right. \\ \left. + \int_0^{t_0} t dt \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp \left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} \right) \Gamma \left(\frac{3}{2}; \frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} - \frac{Z_a \Gamma g}{t_0} e^{-g^{1/2} t_0} \right) - 1 \right] e^{-g^{1/2} t} \right\} \quad (9.152)$$

Введем обозначения

$$I^{(1)} = \int_{t_0}^{\infty} t dt \left[\exp \left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} \right) - 1 \right] e^{-g^{1/2} t} \quad (9.153)$$

$$I^{(2)} = \int_0^{t_0} t dt \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}; \frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t} - \frac{Z_a \Gamma g}{t_0} e^{-g^{1/2} t_0}\right) - 1 \right] e^{-g^{1/2} t} \quad (9.154)$$

Задача состоит в приближенном вычислении этих интегралов в виде разложения по параметрам Γ и t_0 . Эти параметры подчиняются условиям

$$\Gamma < t_0 < 1 \text{ или } \beta e^2 < r_0 < r^D, \quad (9.155)$$

которые означают, что координата точки поворота (9.102) должна находиться между амплитудой кулоновского рассеяния βe^2 и дебаевским радиусом $r^D = 1/\kappa$. В подинтегральном выражении (9.153) введем новую переменную интегрирования $\xi = t/t_0$ и, считая дебаевскую потенциальную энергию возмущением, разложим экспоненту в ряд Тейлора

$$\exp\left(\frac{Z_a \Gamma g}{t} e^{-g^{1/2} t}\right) = \exp\left(\frac{\varepsilon}{\xi} e^{-g^{1/2} t_0 \xi}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \xi^{-n} \exp(-g^{1/2} n t_0 \xi),$$

где введено обозначение

$$\varepsilon = \frac{Z_a \Gamma g}{t_0} \quad (9.156)$$

Подставляя это разложение в (9.153), получим

$$I^{(1)} = t_0^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} \int_1^{\infty} d\xi \xi^{-n+1} \exp[-g^{1/2} t_0 (n+1)\xi] = t_0^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varepsilon^n}{n!} E_{n-1}[-g^{1/2} t_0 (n+1)] \quad (9.157)$$

где $E_{n-1}(z)$ - интегральная показательная функция [1]. Ограничимся тремя членами разложения (9.157)

$$I^{(1)} \simeq t_0^2 \left\{ \varepsilon E_0(2g^{1/2} t_0) + \frac{\varepsilon^2}{2} E_1(3g^{1/2} t_0) + \frac{\varepsilon^3}{6} E_2(4g^{1/2} t_0) \right\} \quad (9.158)$$

В свою очередь, чтобы получить результат типа (9.93), воспользуемся в силу условия (9.155) разложениями интегральных показательных функций по параметру t_0 [1]. Для наших целей достаточно ограничиться членами порядка $t_0 \ln t_0$ и t_0 . Если при этом от параметров ε и t_0 перейти, используя обозначение (9.156), к параметрам ε и Γ , то получим

$$I^{(1)} = (Z_a \Gamma g)^2 \left\{ \frac{1}{2Z_a \Gamma g^{3/2}} - \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{2} (C + \ln(3Z_a \Gamma g^{3/2}) - \ln \varepsilon) + \right. \\ \left. + Z_a \Gamma g^{3/2} \left[\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{3}{2\varepsilon} - \frac{2}{3} + \frac{2}{3} (C + \ln(4Z_a \Gamma g^{3/2}) - \ln \varepsilon) \right] \right\} \quad (9.159)$$

Рассмотрим теперь более сложный интеграл (9.154). Он описывает вклад в термодинамический потенциал от расстояний слева от точки поворота (рис. 9.1), где потенциальная энергия близка к кулоновской. В 9.3 для определения уровня энергии E_{n_0} экранировка была учтена в первом порядке (см. (9.100)). Для этого в уравнении

(9.91) экспонента разлагалась в ряд и были учтены два члена разложения. Аналогичную операцию проделаем и в подынтегральном выражении (9.154), т.е. приближенно будем считать $\exp(-g^{1/2}t) \simeq 1 - g^{1/2}t$. После этого произведем замену переменной

$$Z_a \Gamma g \left(\frac{1}{t} - \frac{1}{t_0} \right) = \xi$$

В результате интеграл приобретает вид

$$I^{(2)} \simeq (Z_a \Gamma g)^2 \int_0^\infty \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(\xi + \varepsilon - Z_a \Gamma g) \Gamma \left(\frac{3}{2}; \xi \right) - 1 \right] \left(\frac{1}{(\xi + \varepsilon)^3} - \frac{Z_a \Gamma g^{3/2}}{(\xi + \varepsilon)^4} \right) d\xi \quad (9.160)$$

Проинтегрируем его три раза по частям (функции в круглых скобках интегрируются, в квадратных скобках - дифференцируются) и сделаем замену

$$\Gamma \left(\frac{3}{2}; \xi \right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erfc} \sqrt{\xi} + \sqrt{\xi} e^{-\xi},$$

где

$$\operatorname{erfc} \sqrt{\xi} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\sqrt{\xi}}^\infty e^{-t^2} dt - \text{дополнительный интеграл вероятностей}$$

После указанных преобразований имеем

$$I^{(2)} = (Z_a \Gamma g)^2 \left\{ -\frac{1}{2\varepsilon^2} - \frac{Z_a \Gamma g^{3/2}}{3\varepsilon^3} [\exp(\varepsilon - Z_a \Gamma g) - 1] + Z_a \Gamma g^{3/2} \exp(\varepsilon - Z_a \Gamma g) \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{-3/2} + \right. \\ \left. + \left(1 - \frac{1}{3} Z_a \Gamma g^{3/2} \right) \exp(\varepsilon - Z_a \Gamma g) \left[\frac{1}{2\varepsilon^2} + \frac{1}{2\varepsilon} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{-3/2} + \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{e^\xi \operatorname{erfc} \sqrt{\xi}}{\xi + \varepsilon} d\xi \right] \right\} \quad (9.161)$$

С помощью интегрального представления [1]

$$e^\xi \operatorname{erfc} \sqrt{\xi} = \frac{2}{\pi} \sqrt{\xi} \int_0^\infty \frac{e^{-t^2} dt}{t^2 + \xi}$$

Интеграл в (9.161) можно записать в более удобной для дальнейших расчетов форме

$$\frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{e^\xi \operatorname{erfc} \sqrt{\xi}}{\xi + \varepsilon} d\xi = \int_0^\infty \frac{e^{-t^2} dt}{t + \sqrt{\varepsilon}} = e^{-\varepsilon} \left[\sqrt{\pi} \int_0^{\sqrt{\varepsilon}} e^{-t^2} dt - \frac{1}{2} E_i(\varepsilon) \right] \quad (9.162)$$

где $E_i(\varepsilon) = -\int_{-\varepsilon}^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt$ - интегральная показательная функция положительного аргумента. Выражение в фигурных скобках в (9.161) необходимо разложить в степенной ряд по параметрам Γ и ε . Как и при выводе формулы (9.159) ограничимся по параметру Γ членами порядка $\Gamma \ln \Gamma$ и Γ , по параметру ε удержим все его отрицательные степени, а также члены $\ln \varepsilon$ и $\varepsilon^{1/2}$. Для интеграла в (9.161) разложение в ряд легко осуществляется с помощью представления (9.162). В результате получается следующее выражение

$$I^{(2)} \simeq (Z_a \Gamma g)^2 \left\{ \frac{3}{4} + \frac{1}{\varepsilon} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{1/2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{-1/2} - \frac{1}{2} (C + \ln \varepsilon) - \right.$$

$$-Z_a \Gamma g^{3/2} \left[\frac{19}{18} + \frac{3}{2\varepsilon} + \frac{1}{\varepsilon^2} - \frac{\sqrt{\pi}}{12} \varepsilon^{-3/2} - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \varepsilon^{-1/2} + \frac{5\sqrt{\pi}}{8} \varepsilon^{1/2} - \frac{2}{3}(C + \ln \varepsilon) \right] \} \quad (9.163)$$

Складывая (9.159) и (9.163), после сокращения подобных членов, получим

$$I^{(1)} + I^{(2)} = (Z_a \Gamma g)^2 \left\{ \frac{1}{2Z_a \Gamma g^{3/2}} + \frac{3}{4} - C - \frac{1}{2} \ln(3Z_a \Gamma g^{3/2}) + \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{1/2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{-1/2} - \right. \\ \left. - Z_a \Gamma g^{3/2} \left[\frac{31}{18} - \frac{4}{3}C - \frac{2}{3} \ln(4Z_a \Gamma g^{3/2}) - \frac{\sqrt{\pi}}{12} \varepsilon^{-3/2} - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \varepsilon^{-1/2} + \frac{5\sqrt{\pi}}{8} \varepsilon^{1/2} \right] \right\}$$

После подстановки этого выражения в (9.152), умножения на двучлен в квадратных скобках и интегрирования по зарядовой переменной, будем иметь

$$I_{ae} = 1 - \frac{1}{2} Z_a \Gamma \left[2C + \ln 3Z_a \Gamma - 2 - \frac{3}{8} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} - \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \varepsilon^{1/2} + \frac{3\sqrt{\pi}}{2} \varepsilon^{-1/2} \right] + \\ + \frac{1}{2} (Z_a \Gamma)^2 \left[\frac{8}{9} \left(2C + \ln 4Z_a \Gamma - \frac{35}{12} \right) - \frac{1}{4} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \left(2C + \ln 3Z_a \Gamma - \frac{11}{6} \right) - \right. \\ \left. - \frac{15\sqrt{\pi}}{22} \varepsilon^{1/2} \left(1 - \frac{3}{10} \frac{Z_a^2 + 1}{Z_a} \right) + \frac{9\sqrt{\pi}}{7} \varepsilon^{-1/2} \left(1 - \frac{Z_a^2 + 1}{4Z_a} \right) + \frac{\sqrt{\pi}}{3} \varepsilon^{-3/2} \right]. \quad (9.164)$$

Литература

- [1] Справочник по специальным функциям под ред. Абрамовича М. и Стиган И. М.:Наука, 1979.
- [2] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский Н.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.:ГИФМЛ, 1962.
- [3] Н.Н.Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике. М.-Л.: Гостехиздат, 1946.
- [4] Бракнер К. Теория ядерной материи. Некоторые вопросы теории многих тел. М.:Мир, 1964.
- [5] Веденов А.А., Ларкин А.И. - ЖЭТФ. 1959. Т. 36 , вып. 4. С. 1133.
- [6] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лапш Г.Б., Ломакин Б.Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е. Теплофизические свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора (под ред. Иевлева В.М.). М.: Атомиздат, 1980.
- [7] Гуров К.П. Основания кинетической теории (метод Н.Н.Боголюбова). М.:Наука, 1966.
- [8] Дубовицкий В.А., Красников Ю.Г., Павлов Г.А. Мат. моделирование. 1993. Т.5, N 11, с. 54.
- [9] Дубовицкий В.А., Красников Ю.Г., Павлов Г.А. Физика плазмы. 1996. Т. 22, N 4, с. 367.
- [10] Займан Дж. Модели беспорядка. М.: Мир, 1986.
- [11] Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971.
- [12] Исихара А. Статистическая физика М.: Мир, 1973.
- [13] Киттель Ч. Элементарная статистическая физика. Пер. с англ. М.: ИИЛ, 1960.
- [14] Красников Ю.Г. ЖЭТФ. 1967. Т. 53, вып. 6, с. 2223.
- [15] Красников Ю.Г. - ЖЭТФ. 1977. Т. 73, вып. 2, с. 516.
- [16] Крефт В., Кремп В., Эбелинг В., Ропке Г. Квантовая статистика системы заряженных частиц. М.: Мир, 1988.
- [17] Крылов Н.С. Работы по обоснованию статистической физики. М-Л.: Изд-во АН СССР, 1950.

- [18] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Часть 1. М.: Наука, 1976.
- [19] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1971.
- [20] Ларкин А.И. - ЖЭТФ. 1960. Т. 38, вып. 6, с. 1896.
- [21] Майер Дж., Гепперт-Майер М. Статистическая механика. М.: Мир, 1980.
- [22] Мюнстер А. Теория флуктуаций (В сб. Термодинамика необратимых процессов пер. с англ. Под ред. Д.Н.Зубарева). М.:ИИЛ, 1962.
- [23] Монтролл Э., Уорд Дж. Квантовая статистика взаимодействующих частиц. I. Общая теория и некоторые замечания относительно свойств электронного газа (Вопросы квантовой теории необратимых процессов, пер. с англ. под ред. В.Л.Бонч-Бруевича.) М.:ИИЛ, 1961.
- [24] Фейнман Р. Статистическая механика. М.: Мир, 1978.
- [25] Фишер И.З. Статистическая теория жидкостей. М.: Физматгиз, 1961.
- [26] Фишер И.З. Современное состояние теории жидкостей (В кн.: Уравнение состояния газов и жидкостей) М.: Наука, 1975.
- [27] Фортов В.Е. УФН. 1982. Т. 138. вып.3 С. 361-412.
- [28] Фортов В.Е., Якубов И.Т. Физика неидеальной плазмы (АН СССР, Черногловка, 1984). М.:Энергоатомиздат, 1994.
- [29] Эбелинг В., Крефт В., Кремп Д. Теория связанных состояний и ионизационного равновесия в плазме и твердом теле. Пер. с нем. М.: Мир, 1979.
- [30] Ebeling W. - Physica, 1969, v. 43, p. 293.
- [31] Egelstaff P.A. Introduction to the liquid State (London. New-York, Acad. Press., 1967)
- [32] Gray S.A. in book Physics of Simple Liquids (eds. H.N.V.Temperly, J.Rowlinson and G.S.Rushbrooke), Nort-Holland Publ. Co., 1968 (имеется перевод: Физика простых жидкостей. М.: Мир, 1971).
- [33] Rowlinson J.S. in book Physics of Simple Liquids (eds. H.N.V. Temperly, J.Rowlinson and G.S.Rushbrooke), North-Holland Publ.Co., 1968 (имеется перевод: Физика простых жидкостей. М.: Мир, 1971)
- [34] Uhlenbeck G.E., Ford G.W. Theory of Linear Graphs. Amsterdam, 1965.
- [35] Wetts R.O., J.Chem.Phys., 30, 1969, p. 984

Часть IV

Процессы переноса в неидеальной плазме

Глава 10

Транспортные процессы в низкотемпературной плазме

10.1 Качественное описание процессов переноса

Процессы переноса определяют пространственные и временные распределения газодинамических, электрических и термодинамических характеристик вещества в лабораторных экспериментах и различных технических устройствах с использованием плазмы в качестве рабочих тел - плотность, массовую скорость, давление, температуру, концентрации компонентов, плотность электрического тока, самосогласованные электрическое и магнитное поля. Коэффициенты переноса или транспортные коэффициенты являются коэффициентами пропорциональности между термодинамическими потоками и термодинамическими силами. К термодинамическим потокам относятся тепловой поток \mathbf{q} , массовые потоки компонентов $\{\mathbf{i}_k\}$, плотность электрического тока \mathbf{j} . Из векторной части производства энтропии [25] следуют линейные соотношения между термодинамическими потоками и термодинамическими силами ∇T , $(\mathbf{E}^* - \nabla_T \mu_e/e)$, ∇c_j (\mathbf{E}^* - электрическое поле в сопутствующей системе координат, μ_e - химический потенциал электронов):

$$\mathbf{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{i}_k + \lambda^E (\mathbf{E}^* - \nabla_T \mu_e/e), \quad (10.1)$$

$$\mathbf{i}_k = \sum_{j=1}^N D_{ij} \nabla c_j + D_k^T \nabla T - D_k^E (\mathbf{E}^* - \nabla_T \mu_e/e), \quad (10.2)$$

$$\mathbf{j} \simeq \mathbf{j}_e = \sigma (\mathbf{E}^* - \nabla_T \mu_e/e) + \alpha \nabla T. \quad (10.3)$$

Приближенное равенство (10.3) отражает тот факт, что в плазме перенос заряда производится в основном электронами. В выражениях (10.1) - (10.3) λ - коэффициент транспортной теплопроводности, λ^E - термоэлектрический коэффициент, D_{ij} - многокомпонентные коэффициенты диффузии, σ , α - электропроводность и термоэдс. Из тензорной части производства энтропии следует выражение для тензора вязких напряжений

$$\Pi_{ij} = \eta \left[\left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial V_k}{\partial x_k} \right] + \zeta \delta_{ij} \frac{\partial V_l}{\partial x_l}, \quad (10.4)$$

где η, ζ - коэффициенты сдвиговой и объемной вязкостей.

При ионизации газа возникают легкие подвижные частицы - электроны, которые определяют такие транспортные свойства, как электропроводность, термоэдс, термоэлектрические коэффициенты и электронную часть теплопроводности. Другие коэффициенты переноса, такие как вязкость, многокомпонентные коэффициенты диффузии тяжелых частиц в меньшей степени зависят от степени ионизации.

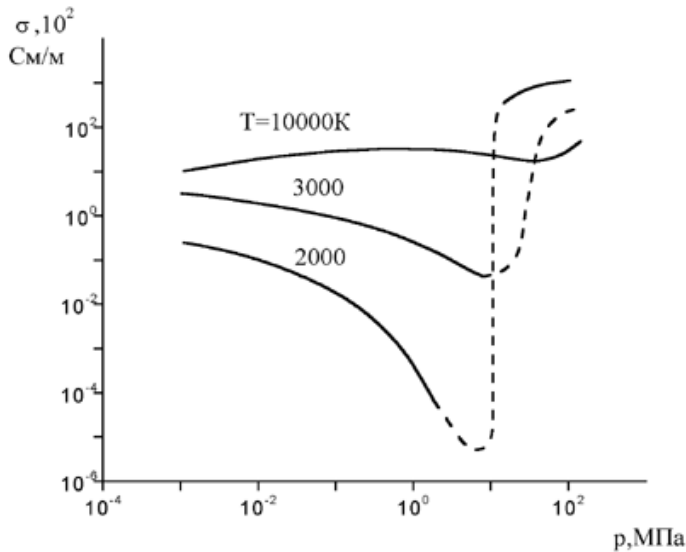


Рис. 10.1: Зависимость электропроводности цезиевой плазмы от давления вдоль изотерм ($\sigma_m^* = 1/\Omega_m^*$)

а на рис. 10.2 - вдоль изобары. Для щелочных металлов общим в поведении электропроводности и теплопроводности при давлениях выше критических, является переход от высоких значений, типичных для жидкого металла, к низким

- в переходной области, затем в высокотемпературной области происходит увеличение значений коэффициентов переноса с ростом степени ионизации.

Изменение теплопроводности металлов при переходе от жидкого металла к плазме меньше, чем электропроводности, так как в слабоионизованной плазме перенос тепла осуществляется в основном атомами и молекулами, а в металле - фононами, вследствие колебаний решетки. Теплопроводность цезия (рис. 10.3) в высокотемпературной области также зависит, в основном, от концентрации и подвижности свободных электронов. Влияние неидеальности на электронные коэффициенты переноса (σ, α) проявляется через из-

Электронные коэффициенты переноса, например, электропроводность, определяются произведением концентрации электронов и их подвижности. Подвижность, как правило, слабо зависит от температуры, а концентрация - резко, в соответствии с аррениусовской зависимостью константы равновесия в формуле Саха от температуры. Поэтому температурная зависимость электронных коэффициентов переноса определяется в первую очередь температурной зависимостью концентрации электронов. В качестве примера на рис. 10.1 приведена электропроводность цезиевой плазмы от давления вдоль изо-

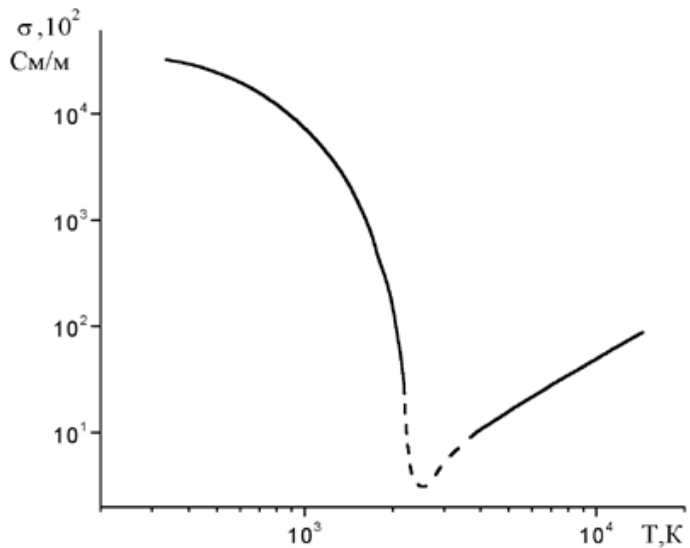


Рис. 10.2: Зависимость электропроводности цезиевой плазмы от температуры при давлении $p = 15$ МПа

Рис. 10.3: Зависимость теплопроводности цезия от температуры при давлении $p = 15$ МПа

менение как ионизационного равновесия в плазме вследствие взаимодействия, так и подвижности свободных электронов. Коэффициент сдвиговой вязкости η определяется

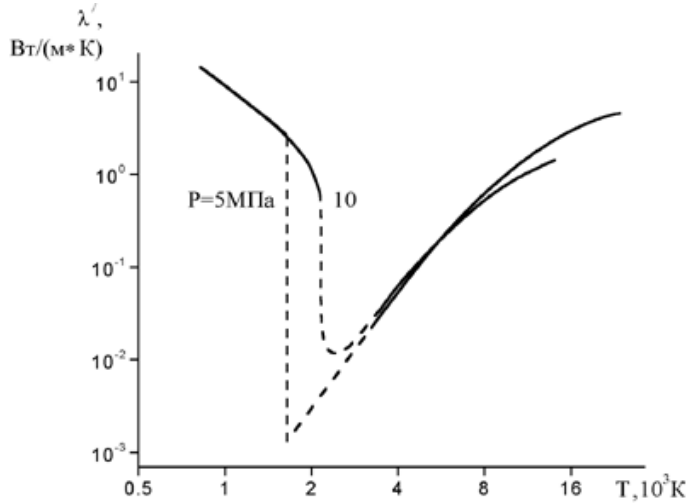


Рис. 10.3: Зависимость теплопроводности цезиевой плазмы от температуры вдоль изобар

свойствами подсистемы тяжелых частиц - молекул, атомов, ионов. Уменьшение коэффициента сдвиговой вязкости натрия (рис. 10.4) в высокотемпературной области обусловлено ионизацией вещества. Качественно влияние неидеальности на теплопроводность проявляется в сдвиге пиков ионизации и диссоциации в высокотемпературную область и их сглаживании, а коэффициент сдвиговой вязкости плазмы с ростом взаимодействия меняется с температурой более плавно, поскольку слабо зависит от концентрации электронов. Для расчета свойств переноса плазмы не-

обходима информация о столкновительных характеристиках частиц плазмы и ее составе. В конкретных устройствах необходимы оценки возникающих электрических и магнитных полей и объемных зарядов, возникающих под действием термоэлектрических сил при движении неоднородной ионизованной среды.

При значительных градиентах температуры необходимо учитывать перенос тепла и массы под действием самосогласованных электрических полей, так как значения соответствующих членов ($\sim \mathbf{E}^*$) в соотношениях (10.1)-(10.3) оказываются порядка членов $\sim \nabla T, \nabla c_a$. При больших магнитных полях (больших значениях параметра Холла для электронов) электроны в промежутках между столкновениями движутся по закрученным орбитам, т.е. являются замагниченными, при этом закон Ома в виде пропорциональности плотности тока проводимости вектору сопутствующего электрического поля нарушается, т.е. при заданных ориентациях электрического и магнитного полей появляется составляющая тока, перпендикулярная плоскости, в которой лежат вектора электрического и магнитного полей - т.н. ток Холла. Величина этого тока определяется параметром Холла $\beta = \omega_e \tau_e \geq 1$, где $\omega_e = eH/mc$ - циклотронная частота электронов, $\tau_e = 1/\nu_e$, ν_e - частота столкновений электронов. Из значения параметра Холла $\beta = 1$ определя-

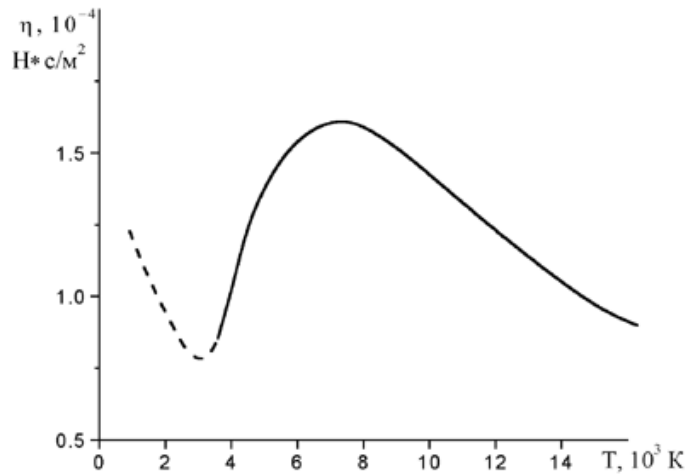


Рис. 10.4: Зависимость вязкости натрия от температуры при $p = 50$ МПа

ется, т.е. при заданных ориентациях электрического и магнитного полей появляется составляющая тока, перпендикулярная плоскости, в которой лежат вектора электрического и магнитного полей - т.н. ток Холла. Величина этого тока определяется параметром Холла $\beta = \omega_e \tau_e \geq 1$, где $\omega_e = eH/mc$ - циклотронная частота электронов, $\tau_e = 1/\nu_e$, ν_e - частота столкновений электронов. Из значения параметра Холла $\beta = 1$ определя-

ется характерное значение магнитного поля, которое не приводит к сколько-нибудь существенной анизотропии в коэффициентах переноса.

В данном разделе учебного пособия рассматриваются методы расчета коэффициентов переноса нейтральных газов, как одного из компонентов низкотемпературной плазмы. Кроме расчетных формул транспортных коэффициентов для читателя полезно будет представлять различные кинетические уравнения, используемые для их расчетов. Проблемы обоснования кинетических уравнений также принципиальны, поскольку они представляют базис для методов расчета коэффициентов переноса. Теоретические методы расчета могут быть основаны не только на кинетическом уравнении, но и методе временных корреляционных функций, который также обсуждается в данном разделе. Во многих случаях, основанных на химической модели плазмы транспортные коэффициенты могут быть оценены на модельных подходах. Наиболее ярко это проявляется для случая слабоионизованной плазмы в плотном газе. В многокомпонентной плазме при температурах в тысячи и десятки тысяч градусов интенсивно протекают химические реакции, которые в некоторых случаях могут на порядок изменить транспортные коэффициенты в области протекания плазмохимических реакций. Обсуждению этих вопросов посвящен отдельный параграф. В заключение формулируются дальнейшие проблемы получения кинетических коэффициентов в плазме с сильным взаимодействием между частицами и проводится сравнение с экспериментальными результатами.

10.2 Транспортные свойства нейтральных газов

10.2.1 Кинетическое уравнение Больцмана

Кинетическое уравнение Больцмана было открыто в 1875 году. За прошедшие 125 лет появилось и продолжает появляться большое число работ, посвященных выводу и обоснованию различных кинетических уравнений. В данной главе рассматриваются методы получения кинетических уравнений в нейтральных газах и плазме исходя из первых принципов, т.е. точных уравнений, описывающих систему N тел, взаимодействующих по заданному потенциалу взаимодействия. Глава содержит лишь краткие сведения по вопросам обоснования кинетической теории, для более детального изучения рассматриваемых вопросов следует обратиться к монографиям [10], [55]. Исходным пунктом кинетической теории являются уравнения, описывающие динамику движения N тел - уравнения Гамильтона и Лиувилля. Из уравнения Лиувилля можно получить эквивалентную незамкнутую цепочку уравнений Боголюбова. Для получения кинетического уравнения - замкнутого уравнения для одночастичной функции распределения необходимы дополнительные предположения. Такими условиями являются гипотезы Боголюбова о характере релаксации неравновесного состояния к равновесному распределению и ослаблении корреляций частиц за время столкновения. Для расцепления цепочки Боголюбова используется приближение вторых корреляционных функций, когда пренебрегается трехчастичными корреляциями частиц. В кинетической теории нейтрального газа делается дополнительное приближение парных столкновений, а в теории плазмы - поляризационное приближение. В заключение обсуждается иерархия кинетических уравнений.

10.2.2 Уравнение Лиувилля и цепочка Боголюбова

Рассмотрим систему N частиц, не имеющих внутренней структуры, находящихся в объеме V . Координаты частиц равны $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$, импульсы $\{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N\}$, энергия взаимодействия каждой пары частиц описывается центральным потенциалом $\Phi_{ij} = \Phi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$. Функция Гамильтона системы имеет вид

$$H = \sum_{1 \leq i \leq N} \left[\frac{p_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i) \right] + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_{ij},$$

$U(\mathbf{r}_i)$ - потенциальная энергия частиц во внешнем поле. Рассмотрим $6N$ -мерное фазовое пространство $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_N) \equiv (x_1 \dots x_N)$, где $x_i = (\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)$. В фазовом пространстве состояние системы изображается точкой. Введем в рассмотрение ансамбль систем, плотно заполняющих некоторую область фазового пространства. Определим N -частичную функцию распределения как плотность вероятности распределения ансамбля систем в фазовом пространстве

$$f_N = f_N(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N, t) \equiv f_N(x_1 \dots x_N, t).$$

С течением времени ансамбль систем перемещается в фазовом пространстве. Поскольку системы не возникают и не исчезают, для f_N справедливо уравнение непрерывности

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \dot{\mathbf{r}}_i + \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \dot{\mathbf{p}}_i \right) = 0. \quad (10.5)$$

Движение частиц, описываемых классической механикой, происходит в соответствии с уравнениями Гамильтона

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i}, \quad \dot{\mathbf{p}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i}. \quad (10.6)$$

Подставляя (10.6) в (10.5), получаем уравнение Лиувилля

$$\frac{\partial f_N}{\partial t} + \{H, f_N\} = 0, \quad (10.7)$$

где введены скобки Пуассона

$$\{H, f_N\} = \sum_{1 \leq i \leq N} \left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}_i} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{r}_i} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial f_N}{\partial \mathbf{p}_i} \right). \quad (10.8)$$

Определим оператор Θ_{ij}

$$\Theta_{ij} = -\{\Phi_{ij}, \} = \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_i} + \frac{\partial \Phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_j} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j}, \quad (10.9)$$

а также оператор Лиувилля

$$L_N^{(0)} = \frac{\partial}{\partial t} + \{H_L^{(0)}, \}, \quad (10.10)$$

где $H_L^{(0)}$ - оператор Гамильтона в отсутствие взаимодействия. Уравнение Лиувилля удобно использовать в виде

$$\left(L_N^{(0)} - \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Theta_{ij} \right) f_N = 0. \quad (10.11)$$

Определим s - частичные функции распределения (V - объем системы)

$$f_s(x_1, \dots, x_N) = V^s \int f_N(x_1, \dots, x_N) dx_{s+1} \dots dx_N. \quad (10.12)$$

Проинтегрируем уравнение Лиувилля (10.11) по координатам x_{s+1}, \dots, x_N . При интегрировании оператор Лиувилля разобьем на две части, а сумму с операторами Θ на три

$$L_N^{(0)} = L_s^{(0)} + \sum_{s < i \leq N} \frac{\mathbf{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i},$$

$$\sum_{1 \leq i < j \leq N} \Theta_{ij} = \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Theta_{ij} + \sum_{1 \leq i \leq s < j \leq N} \Theta_{ij} + \sum_{s < i < j \leq N} \Theta_{ij}.$$

Будем считать, что система помещена в ящик с высокими потенциальными барьерами на стенках, так что функция распределения обращается в нуль при $r_k \rightarrow \infty$ или $p_k \rightarrow \infty$. При интегрировании уравнения Лиувилля последние члены в разложениях операторов обращаются в нуль в силу указанных граничных условий для функции f_N . При интегрировании второго члена в разложении $\sum \Theta$, получится $(N - s)$ одинаковых членов, т.к. переменные под интегралом можно заменить $j \leftrightarrow s + 1$ для $j \neq s + 1$. В результате интегрирования и умножения на V^s , получим цепочку Боголюбова, иногда ее называют цепочкой ББГКИ - по авторам (Боголюбов, Борн, Грин, Кирквуд, Ивон), получившим и исследовавшим уравнения

$$\left(L_s^{(0)} - \sum_{1 \leq i < j \leq s} \Theta_{ij} \right) f_s = \frac{N - s}{V} \sum_{1 \leq i \leq s} \int \Theta_{i,s+1} F_{s+1} dx_{s+1}. \quad (10.13)$$

Система уравнений (10.13) называется "цепочкой", потому что в уравнение для f_1 входит f_2 , в $f_2 - f_3$ и т.д. Цепочка уравнений Боголюбова, или эквивалентное ей уравнение Лиувилля являются основой для получения классических кинетических уравнений газов и плазмы. Анализ цепочки Боголюбова и методы приближенных решений различны для нейтрального газа, когда потенциал является короткодействующим, и плазмы, поскольку кулоновский потенциал является дальнедействующим. Кинетическая теория плазмы должна опираться на знание кинетических свойств как нейтральных частиц, так и плазмы, т.к. при температурах до нескольких десятков тысяч градусов газ является частично ионизованным, т.е. содержит как нейтральные, так и заряженные частицы. В газовом случае единственным безразмерным параметром является $\varepsilon = na^3$, где $n = N/V$ - концентрация частиц, a - область действия потенциала. Для разреженного газа (при нормальных условиях это соответствует давлениям до тысяч атмосфер) параметр газности мал $\varepsilon \ll 1$. Казалось бы полезным, как это делается в статистической физике равновесных состояний, провести разложение функции распределения в ряд по параметру ε и попытаться найти решение методом теории возмущений. Однако, подобный анализ, проведенный Боголюбовым [10], показал, что при этом появляются так называемые секулярные члены

типа $\varepsilon^\alpha t^\beta$, поэтому разложение решения можно провести только на малых временах физически соответствующих временам порядка длительности столкновения a/v_T (v_T - тепловая скорость частиц). Для устранения подобных расхождений Боголюбовым [10] был предложен метод, известный в асимптотической теории нелинейных колебаний. Метод основан на анализе характерных времен релаксации в системе: $\tau_c \sim a/v_T$ - время столкновения, $\tau_k \sim l/v_T$ - время между столкновениями (l - длина пробега частиц), τ_h - характерное время релаксации макроскопических параметров. Между этими временами обычно выполняются неравенства $\tau_c \ll \tau_k \ll \tau_h$. Для устранения секулярных членов используется предположение, что эволюция s -частичной функции распределения происходит следующим образом: за время порядка τ_c устанавливается кинетическая стадия процесса, когда вся временная зависимость любой s -частичной функции распределения от времени определяется одночастичной функцией распределения $f_s(t) = f_s[f_1(t)]$. По истечении времени τ_k наступает гидродинамическая стадия процесса, когда одночастичная функция, а, следовательно, и все s -частичные зависят от времени только через зависимость первых моментов одночастичной функции - плотности, среднемассовой скорости и температуры. Гидродинамическая стадия завершается за время порядка τ_h . Нас будет интересовать кинетическая стадия процесса, определяющаяся одночастичной функцией распределения, поэтому целью кинетической теории является получение замкнутого уравнения для $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$. Поскольку в первое уравнение цепочки Боголюбова входит двухчастичная функция, кинетическое уравнение можно получить, найдя приближенное выражение для $f_2(x_1, x_2, t)$. Если две частицы не коррелируют, т.е. имеют независимые координаты и импульсы, f_2 является произведением одночастичных функций. Определим корреляционную функцию $g_2(x_1, x_2, t)$ соотношением

$$f_2(x_1, x_2) = f(x_1)f(x_2) + g(x_1, x_2).$$

Зависимость от времени здесь опущена, $f \equiv f_1$. Определим также трехчастичную функцию распределения $h(x_1, x_2, x_3)$

$$\begin{aligned} f_3(x_1, x_2, x_3) = & f(x_1)f(x_2)f(x_3) + f(x_1)g(x_2, x_3) + f(x_2)g(x_1, x_3) + \\ & + f(x_3)g(x_1, x_2) + h(x_1, x_2, x_3). \end{aligned} \quad (10.14)$$

Первое приближение, которое будет рассмотрено, заключается в пренебрежении корреляционной функцией $h(x_1, x_2, x_3) = 0$. Запишем первое уравнение цепочки (10.13), где $(N-1)/V \approx n$

$$L_1^{(0)} f(x_1) = n \int \Theta_{12} [f(x_1)f(x_2) + g(x_1, x_2)] dx_2. \quad (10.15)$$

Оператор Θ_{12} под интегралом дает отличное от нуля выражение только при действии на координаты частицы, по которой не происходит интегрирование, т.к. другие члены содержат значения функции при бесконечных значениях импульса:

$$\int \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2)}{\partial \mathbf{p}_2} d\mathbf{p}_2 d\mathbf{r}_2 = 0.$$

Определим среднюю силу, действующую на частицу с учетом действия окружающих частиц

$$\mathbf{F} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1)}{\partial \mathbf{r}_1} - n \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \int \Phi_{12}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) f(x_2) dx_2.$$

Запишем уравнение (10.15) для частиц 1,2 :

$$L_1 f(x_1) \equiv \left[L_1^{(0)} - n \int \Theta_{13} f(x_3) dx_3 \right] f(x_1) = n \int \Theta_{13} g(x_1, x_3) dx_3,$$

$$L_1 f(x_2) \equiv \left[L_2^{(0)} - n \int \Theta_{23} f(x_3) dx_3 \right] f(x_2) = n \int \Theta_{23} g(x_2, x_3) dx_3.$$

Умножим первое из этих уравнений на $f(x_2)$, второе на $f(x_1)$ и сложим:

$$\begin{aligned} L_{12}^{(0)} f(x_1) f(x_2) - n f(x_2) \int \Theta_{13} f(x_1) f(x_3) dx_3 - n f(x_1) \int \Theta_{23} f(x_2) f(x_3) dx_3 = \\ = n \int [\Theta_{13} f(x_2) g(x_1, x_3) + \Theta_{23} f(x_1) g(x_2, x_3)] dx_3. \end{aligned}$$

Вычтем полученное уравнение из второго уравнения цепочки Боголюбова, где учтено (10.14):

$$\begin{aligned} & \left(L_{12}^{(0)} - \Theta_{12} \right) [f(x_1) f(x_2) + g(x_1, x_3)] = \\ & = n \int (\Theta_{13} + \Theta_{23}) [f(x_1) f(x_2) f(x_3) + f(x_1) g(x_2, x_3) + f(x_2) g(x_1, x_3) + f(x_3) g(x_1, x_2)] dx_3. \end{aligned}$$

В результате получим

$$\begin{aligned} L_{12} g(x_1, x_2) & \equiv \left[L_{12}^{(0)} - n \int (\Theta_{13} + \Theta_{23}) f(x_3) dx_3 \right] g(x_1, x_2) = \\ & = \Theta_{12} f_2(x_1, x_2) + n \int [\Theta_{13} f(x_1) g(x_3, x_2) + \Theta_{23} f(x_2) g(x_1, x_3)] dx_3. \end{aligned} \quad (10.16)$$

Это уравнение для корреляционной функции является замкнутым, но решение его существенно зависит от вида потенциала взаимодействия между частицами. В последующих двух параграфах будут рассмотрены методы решения системы уравнений (10.15), (10.16) для газа с короткодействующими потенциалами и для плазмы, где потенциал взаимодействия дальнедействующий.

10.2.3 Кинетические уравнения системы частиц с короткодействующим потенциалом

Для систем нейтральных частиц с короткодействующими потенциалами, когда газовый параметр мал $\varepsilon = na^3 \ll 1$, три характерных размера - радиус действия потенциала a , среднее расстояние между частицами $r_{cp} \sim n^{1/3}$ и длина свободного пробега $l \sim (na^2)^{-1}$ связаны неравенствами

$$\frac{a}{r_{cp}} \sim n^{1/3} a = \varepsilon^{1/3} \ll 1, \quad \frac{r_{cp}}{l} \sim n^{2/3} a^2 = \varepsilon^{2/3} \ll 1.$$

По этой причине одновременное сближение более чем двух частиц маловероятно, поэтому в уравнении для корреляционной функции оказываются малыми все интегральные члены, т.к. в них содержатся произведения типа $\Phi_{13} g_{23}$, которые отличны от нуля только при одновременном сближении трех частиц. Для упрощения вывода интеграла столкновений рассмотрим однородный случай, когда одночастичные функции распределения не зависят от координат, а двухчастичные - зависят только

от относительных координат частиц. В этом приближении из (10.15), (10.16) следует (зависимость от времени у функций для краткости опущена)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{p}_1)}{\partial t} &= n \int \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial g(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)}{\partial \mathbf{p}_1} dx_2, \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_1 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} + \mathbf{v}_2 \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_2} - \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) &= \\ &= \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{p}_1) f(\mathbf{p}_2). \end{aligned} \quad (10.17)$$

Уравнение (10.17) содержит функции распределения, имеющие различные масштабы времени. Одночастичные функции распределения меняются за времена $\tau_k \sim l/v_T$, а двухчастичные - за времена порядка времени столкновения $\tau_c \sim a/v_T$, поэтому произведение $f(\mathbf{p}_1) f(\mathbf{p}_2)$ - медленно меняющаяся функция и, следовательно, правая часть (10.17) содержит малый параметр. Полагая правую часть (10.17) равной нулю, получим однородное уравнение, решение которого определяется значением функции f_2 в более ранние моменты времени. Поскольку характерное время столкновения $\tau_c \sim a/v_T$ можно считать, что в момент времени $t - \tau_c$ частицы не взаимодействовали и $f_2(x_1, x_2, t - \tau_c) = f(x_1, t - \tau_c) f(x_2, t - \tau_c)$. Это условие ослабления начальных корреляций было впервые использовано в кинетической теории газов Боголюбовым [10]. С учетом условия ослабления корреляций решение уравнения (10.17) имеет вид

$$f_2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, t) = f[\mathbf{p}_1(-\infty), t] f[\mathbf{p}_2(-\infty), t]. \quad (10.18)$$

Здесь используется свойство медленности изменения одночастичных функций по сравнению со временами корреляций, $\mathbf{p}_1(-\infty) \equiv \mathbf{P}_1$, $\mathbf{p}_2(-\infty) \equiv \mathbf{P}_2$ - значения импульсов частиц до столкновения, которые в рассматриваемый момент времени переходят в импульсы \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 , так что выполняются законы сохранения энергии и импульса

$$\frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \Phi(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m}, \quad (10.19)$$

$$\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2. \quad (10.20)$$

Проинтегрируем (10.17) по $dx_2 = d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2$

$$\int \left\{ \frac{\partial}{\partial t} [f_2(x_1, x_2) - f(x_1) f(x_2)] + (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{r}_1} - \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{p}_2} \right\} dx_2 = 0.$$

Учитывая нормировку функции f_2 , получаем, что некоторые члены, содержащие f_2 обращаются в нуль, другие равны нулю после интегрирования по \mathbf{p}_2 . В оставшихся интегралах вследствие однородности задачи можно заменить f_2 на g . В результате получаем интеграл столкновения в виде

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}_1)}{\partial t} = n \int \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial g}{\partial \mathbf{p}_1} dx_2 = n \int (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \mathbf{r}_1} dx_2. \quad (10.21)$$

Определим относительную скорость сталкивающихся частиц $\mathbf{v}_{\text{отн}} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$ и подставим решение (10.18) в (10.21):

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}_1)}{\partial t} = n \int \mathbf{v}_{\text{отн}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_1} \{ f[\mathbf{p}_1(-\infty), t] f[\mathbf{p}_2(-\infty), t] \} d\mathbf{r}_2 d\mathbf{p}_2.$$

Введем цилиндрическую систему координат, $\mathbf{r}_1(z, \rho, \varphi)$, направив ось z по относительной скорости \mathbf{v} и проинтегрируем по z

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}_1)}{\partial t} = n \int d\mathbf{p}_2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \rho d\rho \int_{-\infty}^\infty v_{\text{отн}} \frac{\partial}{\partial z} \{f[\mathbf{p}_1(-\infty), t] f[\mathbf{p}_2(-\infty), t]\} dz.$$

Потенциал взаимодействия является центральным, поэтому траектория столкновения частиц лежит в одной плоскости, следовательно рассеяние является азимутально симметричным и можно проинтегрировать по φ . После интегрирования по z возникает разность

$$\{f[\mathbf{p}_1(-\infty), t] f[\mathbf{p}_2(-\infty), t]\} |_{-\infty}^\infty = f(\mathbf{p}'_1, t) f(\mathbf{p}'_2, t) - f(\mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{p}_2, t).$$

Ось z направлена по вектору относительной скорости \mathbf{v} , следовательно на верхнем пределе импульсы частиц являются импульсами после столкновения, а на нижнем пределе - до столкновения. Определяя дифференциальное сечение рассеяния $dQ = 2\pi\rho d\rho$ получаем кинетическое уравнение Больцмана

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = n \int v_{\text{отн}} dQ [f(\mathbf{p}'_1, t) f(\mathbf{p}'_2, t) - f(\mathbf{p}_1, t) f(\mathbf{p}_2, t)] d\mathbf{p}_1. \quad (10.22)$$

Подчеркнем еще раз ограничения, в которых было получено уравнение Больцмана - во-первых, использовалось условие ослабления начальных корреляций за время порядка τ_c . Это условие фактически вводит необратимость в кинетическое уравнение, т.е. для функции

$$H(t) = \langle \ln f(\mathbf{v}, t) \rangle = \int f(\mathbf{v}, t) \ln f(\mathbf{v}, t) d\mathbf{v}$$

выполняется неравенство $dH/dt \leq 0$, в то время как уравнения Гамильтона, Лиувилля или цепочки Боголюбова обратимы. Второе ограничение в выводе уравнения Больцмана - связано с разделением масштабов времен, за которые изменяются корреляционные функции распределения. Третье ограничение связано с разреженностью газа, т.е. пренебрежением трехчастичных и более высоких корреляций. Чтобы учесть влияние плотности на коэффициенты переноса, необходимо учитывать многочастичные столкновения [75], [67].

Решением уравнения Больцмана для равновесного случая является локально равновесное распределение Максвелла

$$f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = n(\mathbf{r}, t) \left[\frac{m}{2\pi kT(\mathbf{r}, t)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m[\mathbf{v} - \mathbf{v}_0(\mathbf{r}, t)]^2}{2kT(\mathbf{r}, t)} \right\}. \quad (10.23)$$

В неравновесном случае функция распределения нормируется так, чтобы первые пять моментов совпадали со значениями для равновесной функции распределения

$$n = \langle 1 \rangle, \quad \mathbf{v}_0 = \langle \mathbf{v} \rangle, \quad \frac{3}{2}kT = \langle \frac{mv^2}{2} \rangle.$$

Из уравнения Больцмана могут быть получены гидродинамические уравнения. Умножая уравнение Больцмана на инвариант столкновения и интегрируя по скоростям, получаем уравнение переноса

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n\psi \rangle + \nabla \cdot \langle n\psi \mathbf{v} \rangle - n \left\{ \frac{\partial \langle \psi \rangle}{\partial t} + \langle \mathbf{v} \cdot \nabla \psi \rangle + \mathbf{a} \cdot \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}} \right\rangle \right\} = 0.$$

Полагая $\psi = 1$, $m\mathbf{v}$, $mv^2/2$, получаем уравнения непрерывности, движения и энергии

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \mathbf{v}_0 = 0, \quad (10.24)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho \mathbf{v}_0 + \nabla \cdot \rho \mathbf{v}_0 \mathbf{v}_0 = -\nabla p + \nabla \cdot \Pi + \rho \mathbf{F}, \quad (10.25)$$

$$\frac{3}{2}nk \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla T \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \Pi : \nabla \mathbf{v}_0, \quad (10.26)$$

где $\rho = mn$ - плотность газа, а тензор вязких напряжений и поток тепла определяется формулами

$$\begin{aligned} \Pi_{ik} &= nm \langle (v_i - v_{oi})(v_k - v_{ok}) \rangle, \\ \mathbf{q} &= nm \langle \frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2}{2} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) \rangle. \end{aligned}$$

Здесь используются тензорные обозначения $\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} = a_i v_i$, $\Pi : \nabla \mathbf{v} = \Pi_{ik} \partial v_i / \partial x_k$.

Таким образом, уравнение Больцмана является необратимым, нелинейным и приводит к гидродинамическим уравнениям.

10.2.4 Коэффициенты переноса нейтральных газов

В этом параграфе рассмотрим задачи вычисления коэффициентов переноса - вязкости, теплопроводности и диффузии методом Чепмена-Энскога и получим формулы, позволяющие вычислять коэффициенты переноса нейтральных газов. Здесь будут использоваться следующие обозначения: \mathbf{v} - скорость молекулы, \mathbf{v}_0 - среднемассовая скорость движения среды, $\mathbf{u} = (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) / \sqrt{m/2kT}$, -безразмерная относительная скорость молекул, $u^2 = x$, поэтому функция распределения Максвелла может быть записана в виде

$$f(\mathbf{v})d\mathbf{v} = f(x)dx, \quad f(x) = n(2/\sqrt{\pi})x^{1/2}e^{-x}. \quad (10.27)$$

В методе Чепмена-Энскога решения уравнения Больцмана используется теория возмущений по числу Кнудсена, т.е. функция распределения записывается в виде $f = f^{(0)}(1 + \chi)$, где $f^{(0)}$ определяется формулой (10.23), с пространственно-временной зависимостью от моментов $n(\mathbf{r}, t)$, $\mathbf{v}_0(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$. Временные произведения исключаются с помощью уравнений гидродинамики идеального газа (10.24) – (10.26), где $\Pi = 0$, $\mathbf{q} = 0$. В результате получается система уравнений:

$$\begin{aligned} f^{(0)} \left[\left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{v} \cdot \nabla \ln T + \frac{m}{kT} \left(\mathbf{v}\mathbf{v} - \frac{1}{3}\delta v^2 \right) : \nabla \mathbf{v}_0 \right] = \\ \int f^{(0)}(\mathbf{v})f^{(0)}(\mathbf{v}_1)|\mathbf{v} - \mathbf{v}_1|dQ [\chi(\mathbf{v}') + \chi(\mathbf{v}'_1) - \chi(\mathbf{v}) - \chi(\mathbf{v}_1)] d\mathbf{v}_1. \end{aligned} \quad (10.28)$$

Вследствие условий нормировки, которым удовлетворяют функции f и $f^{(0)}$, для функции χ должны выполняться равенства

$$\langle \chi \rangle_0 = 0, \quad \langle \chi \mathbf{v} \rangle_0 = 0, \quad \langle \chi(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 \rangle_0 = 0. \quad (10.29)$$

Обозначение $\langle \rangle_0$ указывает, что усреднение выполняется по функции $f^{(0)}$. Уравнение (10.28) является неоднородным линейным уравнением. Решениями однородного

уравнения являются инварианты столкновений $\chi = 1$, $m\mathbf{v}$, $mv^2/2$, а решение неоднородного уравнения должно быть таким, чтобы выполнялись условия (10.29), т.е. необходимо найти решения неоднородного уравнения, ортогональные к решениям однородного уравнения. В соответствии с методом Чепмена-Энскога решение неоднородного линейного уравнения (10.28) ищем в виде

$$\chi(\mathbf{v}) = -A(u^2)\mathbf{u} \cdot \nabla \ln T - B(u^2)(\mathbf{u}\mathbf{u} - \frac{1}{3}\delta u^2) : \nabla \mathbf{v}_0.$$

При этом скалярные равенства (10.29) удовлетворяются тождественно, а векторное условие на функцию $A(u^2)$ имеет вид:

$$\int f^{(0)}(u)u^2 A(u)^2 d^3 u = \int_0^\infty A(x)x^{3/2} e^{-x} dx = 0. \quad (10.30)$$

Разложим функции $A(x)$, $B(x)$ в ряд по ортогональным полиномам. Возникает вопрос - по какому набору полиномов проводить разложение? Ответ на этот вопрос заключается в следующем [41]. Набор ортогональных полиномов определяется однозначно, если задан интервал $\{x\}$, на котором производится разложение и весовая функция на этом интервале. В рассматриваемой задаче интервал $0 < x < \infty$, а весовая функция имеет вид (см. (10.27)) $x^r \exp(-x)$. В этом случае полным набором ортогональных полиномов являются полиномы Сонина-Лагерра

$$L_n^r = \frac{1}{n!} e^x x^r \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{-r}, \quad L_n^r(x) = \sum_{m=0}^n (-1)^m x^m \frac{n! \Gamma(n+r+1)}{m! \Gamma(m+r+1) \Gamma(n-m+1)},$$

удовлетворяющих условию нормировки

$$\langle L_n^r | L_{n'}^r \rangle = \int_0^\infty e^{-x} x^r L_n^r(x) L_{n'}^r(x) dx = \delta_{nn'} n! \Gamma(n+r+1). \quad (10.31)$$

Напомним, что для полуцелых значений $\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = (\sqrt{\pi}/2^n)(2n-1)!!$. В методе Чепмена-Энскога для коэффициентов $A(x)$ будут использоваться полиномы с $r = 3/2$, для $B(x)$ с $r = 5/2$. Первые полиномы $L_{0,1}^r(x)$ имеют вид

$$L_0^{3/2}(x) = 1, \quad L_1^{3/2}(x) = \frac{5}{2} - x, \quad L_0^{5/2}(x) = 1, \quad L_1^{5/2}(x) = \frac{7}{2} - x. \quad (10.32)$$

Таким образом, ищем решение для $A(x)$, $B(x)$ в виде рядов

$$A(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n L_n^{3/2}(x), \quad B(x) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n L_n^{5/2}(x). \quad (10.33)$$

Найдем уравнения, определяющие A_n . Из (10.30) с учетом (10.32) следует $A_0 = 0$. Подставим разложение (10.33) в (10.28):

$$\int f^{(0)}(u) f^{(0)}(u_1) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| dQ \sum_{n=0}^{\infty} A_n \left[\mathbf{u}' L_n^{3/2}(u'^2) + \mathbf{u}_1' L_n^{3/2}(u_1'^2) - \mathbf{u} L_n^{3/2}(u^2) - \mathbf{u}_1 L_n^{3/2}(u_1^2) \right] \cdot d^3 u_1 = \left(u^2 - \frac{5}{2} \right) \mathbf{u} f^{(0)}(u). \quad (10.34)$$

Умножая это уравнение на $\mathbf{u}L_s^{3/2}(u^2)$ и интегрируя по \mathbf{u} , в правой части получим

$$\begin{aligned} \int d^3u e^{-u^2} u^2 \left(u^2 - \frac{5}{2}\right) L_s^{3/2}(u^2) &= \frac{2n}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} \left(x - \frac{5}{2}\right) L_s^{3/2}(x) = \\ &= -\frac{2n}{\sqrt{\pi}} \langle L_1^{3/2} | L_s^{3/2} \rangle = -\frac{2n}{\sqrt{\pi}} \cdot 1! \left(\frac{3}{2} + 1\right)! \delta_{s1} = -\frac{15}{4} n \delta_{s1}. \end{aligned}$$

Поэтому из (10.34) получаем систему уравнений, определяющих A_r

$$\sum_{r=1}^{\infty} \alpha_{sr} A_r = \frac{15}{4} n \delta_{s1}, \quad (10.35)$$

где коэффициенты α_{sr} имеют вид

$$\begin{aligned} \alpha_{sr} &= \int d^3u d^3u_1 f^{(0)}(u) f^{(0)}(u_1) |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| dQ L_s^{3/2}(u^2) \times \\ &\times \left[\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}' L_r^{3/2}(u'^2) + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'_1 L_r^{3/2}(u'^2_1) - u^2 L_r^{3/2}(u^2) - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_1 L_r^{3/2}(u^2_1) \right]. \end{aligned}$$

В приближении, когда учитывается один полином Сонина-Лагерра (10.32)

$$A_1 = \frac{15}{4} \frac{n}{\alpha_{11}}, \quad (10.36)$$

$$\alpha_{11} = \frac{n^2}{\pi^3} \int d^3u d^3u_1 |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| dQ e^{-(u^2+u_1^2)} u^2 \left[\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}' u'^2 + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'_1 u'^2_1 - u^4 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_1 u^2_1 \right].$$

Член, содержащий $5/2$ в $L_1^{3/2}$ сокращается. Вычисления α_{11} проводятся в системе центра масс $\mathbf{v} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$, $\mathbf{w} = (1/2)(\mathbf{v} + \mathbf{v}_1) = (1/2)(\mathbf{v}' + \mathbf{v}'_1)$. В процессе столкновения центр масс сохраняет свою скорость, и сохраняется модуль относительной скорости, вектор относительной скорости поворачивается в направлении \mathbf{n} на угол рассеяния ϑ . В этих переменных скорости частиц до и после столкновения определяются формулами:

$$\mathbf{u} = \mathbf{w} + \frac{1}{2}\mathbf{v}, \quad \mathbf{u}' = \mathbf{w} + \frac{1}{2}v\mathbf{n}, \quad \mathbf{u}_1 = \mathbf{w} - \frac{1}{2}\mathbf{v}, \quad \mathbf{u}'_1 = \mathbf{w} - \frac{1}{2}v\mathbf{n}, \quad d^3u d^3u_1 = d\mathbf{v} d^3w. \quad (10.37)$$

Тогда выражение, содержащееся в α_{11} преобразуется следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'_1 u'^2 + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}'_1 u'^2 - u^4 - \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_1 u^2_1 &= \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{w} \cdot \mathbf{n})v^2 + 2(\mathbf{w} \cdot \mathbf{n})^2 v^2 - 2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})^2 - v^2(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w}). \end{aligned}$$

Переходя в выражении α_{11} к переменным \mathbf{w} , \mathbf{v} , можно провести усреднение (интегрирование) по направлениям вектора \mathbf{w} . В результате получается

$$\overline{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{w} \cdot \mathbf{n})v^2 + 2(\mathbf{w}\mathbf{n})^2 v^2 - 2(\mathbf{v}\mathbf{w})^2 - v^2(\mathbf{v}\mathbf{w})} = -\frac{2}{3}v^4 w^2 (1 - \cos^2 \vartheta).$$

Приведем пример усреднения одного из членов

$$\overline{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{w})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{w})} = \overline{v^2 w^2 \cos \vartheta_1 (\sin \vartheta_1 \sin \varphi_1 \sin \vartheta + \cos \vartheta_1 \cos \vartheta)} = \frac{1}{3}v^2 w^2 \cos \vartheta.$$

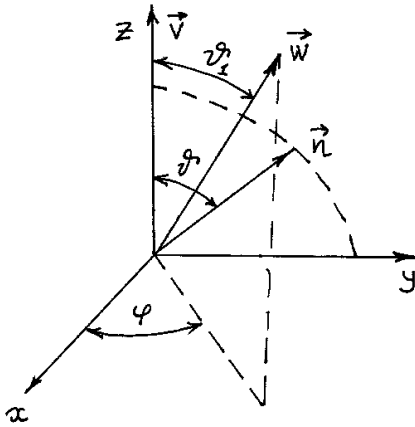


Рис. 10.5: Система координат для вычисления столкновительных интегралов

Интегрирование выполняется в системе координат, приведенной на рис. 10.5, в которой ось z направлена по вектору \mathbf{v} , вектор \mathbf{n} лежит в плоскости yz . ϑ - угол рассеяния, а вектор \mathbf{w} имеет угловые координаты ϑ_1, φ . Введем обозначение сечения рассеяния порядка l :

$$Q^{(l)}(v) = \int (1 - \cos^l \vartheta) dQ. \quad (10.38)$$

При $l = 1$ это "транспортное" или "диффузионное" сечение рассеяния, при $l = 2$ "вязкостное", эти названия связаны с тем, что коэффициенты переноса выражаются через соответствующие сечения. После подстановок в выражение α_{11} получаем

$$\alpha_{11} = -\frac{n^2}{24\pi^3} \int d^3 w w^2 e^{-w^2} \int d\mathbf{v} v^5 e^{-v^2/2} Q^{(2)}(v). \quad (10.39)$$

Определим столкновительные интегралы

$$\Omega^{(l,s)}(T) = \sqrt{\frac{kT}{2\pi\mu}} \int_0^\infty dx e^{-x^2} x^{2s+3} Q^{(l)} \left(x \sqrt{\frac{2kT}{\mu}} \right), \quad (10.40)$$

где $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ - приведенная масса взаимодействующих частиц. $\Omega^{(l,s)}$ имеют размерность $v_T Q$, так что $n\Omega^{(l,s)}$ является эффективной частотой столкновений. Интегрируя (10.39) по \mathbf{w} и используя (10.40), получаем

$$\alpha_{11} = -4n^2 \sqrt{\frac{m}{2kT}} \Omega^{(2,2)}(T), \quad A_1 = -\frac{15}{16} \sqrt{\frac{2kT}{m}} \frac{1}{n\Omega^{(2,2)}(T)}.$$

Перейдем к вычислению B , считая в (10.28) температуру постоянной, а скорость \mathbf{v}_0 зависящей от координаты. Подставим разложение (10.33) в (10.28). Дополнительного ограничения типа (10.30) для коэффициентов B_n нет, поэтому в разложение входит член $r = 0$. Умножим (10.28) на $u_i u_k L_s^{5/2}(u^2)$ и проинтегрируем по u . В правой части равенства получим

$$2 \int d^3 u u_i u_k \left(u_i u_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} u^2 \right) f^{(0)}(u) L_s^{5/2}(u^2) = \frac{8n}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx x^{5/2} e^{-x} L_s^{5/2}(x).$$

Учитывая определение (10.32) и нормировку (10.31), находим, что это выражение равно

$$\frac{8n}{3\sqrt{\pi}} \langle L_0^{5/2} | L_s^{5/2} \rangle = 5n\delta_{s0},$$

тогда уравнение (10.28) имеет вид

$$\sum_{r=0}^{\infty} \beta_{rs} B_r = 5n\delta_{s0}. \quad (10.41)$$

Вычислим коэффициент разложения β_{00} , аналогично α_{11}

$$\beta_{00} = -\frac{n^2}{\pi^3} \int d^3 u d^3 u_1 |\mathbf{u} - \mathbf{u}_1| dQ e^{-(u^2+u_1^2)} [(\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_1')^2 + (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}')^2 - (\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}_1)^2 - u^4].$$

После замены переменных (10.37) выражение в квадратных скобках становится равным

$$\frac{2}{15}[(\mathbf{w} \cdot \mathbf{n})^2 v^2 + 2(\mathbf{w} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})v^2 - (\mathbf{w} \cdot \mathbf{v})^2 - 2v^2(\mathbf{w} \cdot \mathbf{v}) + (\mathbf{v} \cdot \mathbf{n})^2 v^2 - v^4].$$

После усреднения по направлениям вектора w это выражение дает $-(v^4/8)(1 - \cos^2 \vartheta)$. Учитывая определение сечений (10.38), получаем

$$\beta_{00} = \frac{n^2}{64\pi^3} \int d^3 w e^{-w^2/2} \int d\mathbf{v} \cdot v^5 e^{-v^2/2} Q^{(2)}(v).$$

Интегрируя по \mathbf{w} и выражая ответ через $\Omega^{(l,s)}$ - интегралы (10.40), получаем

$$\beta_{00} = 4n^2 \Omega^{(2,2)}, \quad B_0 = \frac{5}{4n^2 \Omega^{(2,2)}(T)}.$$

Решение кинетического уравнения, учитывающего первые члены полиномов разложения $L_1^{3/2}$ и $L_0^{5/2}$ с учетом A_1 , B_0 имеет вид

$$\chi(\mathbf{v}) = \frac{1}{n\Omega^{(2,2)}} \left[\frac{15}{16} \left(\frac{mv}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{v} \cdot \nabla \ln T - \frac{5}{8} \frac{m}{kT} \left(\mathbf{v}\mathbf{v} - \frac{1}{3} \delta v^2 \right) : \nabla v_0 \right]. \quad (10.42)$$

С помощью этого выражения вычислим тепловой поток и тензор вязких напряжений

$$\mathbf{q} = \left\langle \frac{mv^2}{2} \mathbf{v} \right\rangle = \int d\mathbf{v} f^{(0)}(v) \chi(v) \frac{mv^2}{2} \mathbf{v}.$$

Подставляя сюда (10.42), получаем

$$\mathbf{q} = \frac{5}{4\sqrt{\pi}} \frac{kT}{m\Omega^{(2,2)}} \int_0^\infty dx x^{3/2} x e^{-x} L_1^{3/2}(x) \nabla T = -\lambda \nabla T.$$

Интеграл вычисляется с учетом равенства $x = (5/2)L_0^{3/2}(x) - L_1^{3/2}(x)$ и ортонормированности полиномов Сонина-Лагерра. В результате получаем коэффициент теплопроводности газа

$$\lambda = \frac{75}{32} \frac{T^2}{m\Omega^{(2,2)}}. \quad (10.43)$$

Вычислим тензор вязких напряжений в соответствии с определением

$$\Pi_{ik} = m \int d\mathbf{v} f^{(0)}(v) (v_i - v_{0i})(v_k - v_{0k}).$$

При интегрировании по угловым переменным \mathbf{v} учтем, что при усреднении по углам

$$v_i v_k = \frac{1}{3} \delta_{ik} v^2, \quad v_i v_k v_l v_j = \frac{1}{15} (\delta_{ik} \delta_{kj} + \delta_{il} \delta_{kj} + \delta_{ij} \delta_{kl}) v^4.$$

При интегрировании по \mathbf{v} с помощью (10.31) и замены индексов суммирования получаем

$$\Pi_{ik} = \eta \left[\left(\frac{\partial v_{0i}}{\partial x_k} + \frac{\partial v_{0k}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ik} \frac{\partial v_{0l}}{\partial x_l} \right],$$

где коэффициент вязкости равен

$$\eta = \frac{5T}{8\Omega^{(2,2)}}. \quad (10.44)$$

Перейдем к вычислению коэффициента диффузии. В этом случае необходимо рассматривать по крайней мере бинарную смесь газов. Для частиц сорта "а" выражение, содержащее поправку к равновесному решению сохраняет вид аналогичный (10.28). Преобразуем левую часть кинетического уравнения

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_a \cdot \nabla + \frac{\mathbf{F}_a}{m_a} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_a} \right) f_a^{(0)} &= \frac{\partial f_a^{(0)}}{\partial n_a} \frac{dn_a}{dt} + \frac{\partial f_a^{(0)}}{\partial \mathbf{v}_0} \cdot \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} + \frac{\partial f_a}{\partial T} \frac{dT}{dt} + \\ &+ \mathbf{v}_a \cdot \nabla n_a \frac{\partial f_a}{\partial n_a} + \mathbf{v}_a \cdot \nabla T \frac{\partial f_a}{\partial T} + \mathbf{v}_a \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_0} : \frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m_a} \cdot \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{v}_a}. \end{aligned} \quad (10.45)$$

Здесь введено обозначение $d/dt = \partial/\partial t + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla$. Учтем уравнения гидродинамики идеального газа (10.24 - 10.26) в форме

$$\frac{dn_a}{dt} = -n_a \nabla \cdot \mathbf{v}_0, \quad \frac{d\mathbf{v}_0}{dt} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \sum_b n_b \mathbf{F}_b, \quad \frac{dT}{dt} = -\frac{2}{3} T \nabla \cdot \mathbf{v}_0.$$

После подстановки производных по времени макроскопических параметров, уравнение (10.28) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} f_a^{(0)} \left[\frac{m_a}{kT} \left(\mathbf{v}_a \mathbf{v}_a - \frac{1}{3} \delta v^2 \right) : \nabla \mathbf{v}_0 + \left(\frac{m_a v_a^2}{2kT} \right) \mathbf{v}_a \cdot \nabla \ln T + \frac{n}{n_a} \mathbf{d}_0 \cdot \mathbf{v}_0 \right] = \\ = \sum_b \int d\mathbf{v}_b |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| dQ_{ab} f_a^{(0)} f_b^{(0)} (\chi'_a + \chi'_b - \chi_a - \chi_b). \end{aligned}$$

Здесь введена "термодинамическая сила"

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_a &= \frac{n_a}{n} \left(\nabla \ln T - \frac{m_a}{\rho kT} \nabla p + \frac{m_a}{\rho kT} \sum_b n_b \mathbf{F}_b + \nabla \ln n_a - \frac{\mathbf{F}_a}{kT} \right) = \\ &= \frac{n_a m_a}{\rho p} \left(\sum_b n_b \mathbf{F}_b - \frac{\rho}{m_a} \mathbf{F}_a \right) - \frac{n_a m_a}{\rho} \nabla \ln p + \frac{n_a}{n} \nabla \ln n_a T. \end{aligned} \quad (10.46)$$

Дополнительные условия для неравновесной функции распределения, которые следуют из равенства первых пяти моментов $f_a^{(0)}$ и $f_a = f_a^{(0)}(1 + \chi_a)$ имеют вид

$$\langle \chi_a \rangle_0 = 0, \quad \sum_a m_a \langle \chi_a v_a \rangle = 0, \quad \sum_a \langle \chi_a \frac{m_a v_a^2}{2} \rangle = 0.$$

Решение неоднородной системы уравнений (10.45) для бинарной смеси, как и для вычисления вязкости и теплопроводности будем искать в виде

$$\chi_a(u_a) = -A^{(0)}(u_a^2) \mathbf{u}_a \cdot \nabla \ln T - B^{(0)}(u_a^2) \left(\mathbf{u}_a \mathbf{u}_a - \frac{1}{3} \delta u_a^2 \right) : \nabla \mathbf{v}_0 + c^{(a)}(u_a^2) n \mathbf{u}_a \cdot \mathbf{d}. \quad (10.47)$$

Для бинарной смеси

$$\mathbf{d} \equiv \mathbf{d}_a = \frac{n_a n_b}{\rho n} \left[\frac{m_a \mathbf{F}_b - m_b \mathbf{F}_a}{T} + (m_b - m_a) \nabla \ln T + m_b \nabla \ln n_a - m_a \nabla \ln n_b \right] = -\mathbf{d}_b,$$

функции A , B и C разлагаем в ряд по полиномам Сонина-Лагерра:

$$A^{(a)}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{(a)} L_n^{3/2}(x), \quad B^{(a)}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{(a)} L_n^{5/2}(x), \quad C^{(a)}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{(a)} L_n^{3/2}(x). \quad (10.48)$$

Дополнительные условия на коэффициенты A , C определяются из (10.46):

$$n_a \sqrt{m_a} A_0^{(a)} + n_b \sqrt{m_b} A_0^{(b)} = 0, \quad n_a \sqrt{m_a} C_0^{(a)} + n_b \sqrt{m_b} C_0^{(b)} = 0. \quad (10.49)$$

Для вычисления коэффициента диффузии бинарной смеси предположим, что температура постоянна и среда находится в покое (или движется как целое с постоянной скоростью), т.е. $\nabla T = 0$, $\mathbf{v}_0 = 0$. Удерживая лишь один полином в разложении (10.48), получим

$$\chi_a = n \mathbf{d} \cdot \mathbf{n}_a C_0^{(a)}. \quad (10.50)$$

Для второго сорта $C_0^{(b)}$ выражается через $C_0^{(a)}$ с помощью дополнительного условия (10.49). Подстановка в уравнение (10.45) дает

$$\frac{1}{n_a} f_a^{(0)} \mathbf{v}_a = \int d\mathbf{v}_b dQ_{ab} |\mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b| f_a^{(0)} \sqrt{\frac{m_a}{2T}} \left[\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_a - \frac{n_a}{n_b} (\mathbf{v}'_b - \mathbf{v}_b) \right] C_0^{(a)}. \quad (10.51)$$

В правой части учитываются только столкновения различных частиц, т.к. для одинаковых частиц соответствующий член обращается в нуль вследствие закона сохранения импульса. Умножая (10.51) на \mathbf{v}_a , интегрируя по \mathbf{v}_a и учитывая сохранение импульса при столкновениях, получим

$$C_0^{(a)} = \frac{48\sqrt{2\pi^3 m_b}}{n_a \rho} \left[\frac{m_a^3 m_b^{3/2}}{T^{9/2}} \int d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b dQ_{ab} |\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_b| (\mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_a)^2 e^{-(m_a v_a^2 - m_b v_b^2)/2kT} \right]^{-1}.$$

Вычисления проведем с использованием скорости центра масс и относительной скорости

$$\frac{m_a \mathbf{v}_a + m_b \mathbf{v}_b}{m_a + m_b} = \mathbf{W}, \quad \mathbf{v}_a - \mathbf{v}_b = \mathbf{v}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

В этих переменных скорости частиц до и после столкновения

$$\mathbf{v}_a = \mathbf{W} + \frac{\mu}{m_1} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}'_a = \mathbf{W} + \frac{\mu}{m_1} v \mathbf{n}, \quad \mathbf{v}_b = \mathbf{W} - \frac{\mu}{m_2} \mathbf{v}, \quad \mathbf{v}'_b = \mathbf{W} - \frac{\mu}{m_2} v \mathbf{n},$$

$$m_a v_a^2 + m_b v_b^2 = (m_a + m_b) W^2 + \mu v^2, \quad \mathbf{v}'_a - \mathbf{v}_a = \frac{\mu}{m_1} (v \mathbf{n} - \mathbf{v}).$$

Якобиан преобразования переменных $d\mathbf{v}_a d\mathbf{v}_b = d^3 W d\mathbf{v}$. После подстановки и интегрирования получаем

$$C_0^{(a)} = -\frac{3}{16} \sqrt{\frac{2kT}{m_a}} \frac{m_a + m_b}{\rho n_a \Omega^{(1.1)}(T)}, \quad (10.52)$$

где $\Omega^{(1.1)}(T)$ определяется формулой (10.40). Подставляя (10.52) в (10.50), найдем поправку к функции распределения. Вычислим диффузионный поток частиц сорта "а", используя добавку к функции распределения в форме (10.47)

$$\mathbf{i}_a = m_a n_a \langle \mathbf{v}_a \rangle = m_a \sqrt{\frac{m_a}{2kT}} \frac{1}{3} \int d^3 u_a u_a^2 f_a^{(0)} \left[-A^{(a)}(u_a^2) \nabla \ln T + n \mathbf{d} C^{(a)}(u_a^2) \right].$$

Перепишем это выражение в виде

$$\mathbf{i}_a = -\frac{n^2 m_a m_b}{\rho} D_{ab} \mathbf{d} - D_a^T \nabla \ln T,$$

где коэффициенты диффузии D_{ab} и термодиффузии D_a^T определяются интегралами

$$\int_0^\infty dx x^{3/2} e^{-x} C_a(x) = \sum_{r=0}^\infty \langle L_0 | L_r \rangle C_r^{(a)} = C_0^{(a)}.$$

Таким образом, коэффициенты диффузии и термодиффузии равны

$$D_{ab} = -\frac{\rho n_a}{n m_b} \sqrt{\frac{kT}{2m_a}} C_0^{(a)}, \quad D_a^T = n_a m_a \sqrt{\frac{kT}{2m_a}} A_0^{(a)}.$$

Диффузионный поток иногда записывают в виде

$$\mathbf{i}_a = \frac{n^2 m_a m_b}{\rho} D_{ab} (\mathbf{d}_a + k_T \nabla \ln T),$$

где термодиффузионное отношение k_T определяется формулой

$$k_T = \frac{\rho}{n^2 m_a m_b} \frac{D_a^T}{D_{ab}} = -\frac{A_0^{(a)}}{n C_0^{(a)}}.$$

Подставляя $C_0^{(a)}$ (10.52) в (10.48), получаем

$$D_{ab} = \frac{3kT}{16\mu n \Omega^{(1.1)}(T)}. \quad (10.53)$$

Вычисление коэффициента термодиффузии в принципе не отличается от вычисления коэффициентов D_{ab} , λ , η , но требует более сложных выкладок [74], [16], [67], [55].

Приведем результаты вычислений коэффициентов переноса нейтральных газов. Для газа одного сорта вязкость и теплопроводность определяются формулами (10.44) и (10.43), коэффициенты диффузии - формулой (10.53). Способ вычисления коэффициентов переноса чистых газов, таким образом, сводится к следующему. Вначале определяются потенциалы взаимодействия частиц методами квантовой механики [60], затем вычисляются сечения рассеяния по известному потенциалу [60], далее определяются интегралы столкновений $\Omega^{(l,s)}$ и, наконец, коэффициенты переноса. Для смесей газов при строгом вычислении вначале необходимо решить систему линейных уравнений типа (10.35) или (10.41), затем вычислив коэффициенты $A_0^{(a)}$, $C_0^{(a)}$, $B_0^{(a)}$, по формулам Крамера, найти коэффициенты переноса. Вычисления оказываются достаточно сложными, т.к. в системе N сортов частиц для вычисления коэффициентов вязкости и теплопроводности и диффузии формулы содержат определители порядка N , а для коэффициентов термодиффузии - порядка $2N$. Иногда для упрощения расчетов используются приближенные формулы, основанные на том, что в элементарной кинетической теории кинематическая вязкость, температуропроводность и коэффициенты диффузии определяются формулами

$$\frac{\eta}{\rho} = \nu \sim \frac{\lambda}{\rho c_p} = \chi \sim D \sim \frac{l v_T}{3},$$

где v_T - тепловая скорость частиц, l - длина пробега. Сравнение с точными формулами дает выражение для длины свободного пробега части сорта a в столкновениях с частицами сорта b $l_{ab} = 1/n_b Q_{ab}^{(2.2)}$, где усредненные сечения выражаются через столкновительные интегралы $Q_{ab}^{(2.2)} = \Omega_{ab}^{(l,s)}/v_T$. При столкновениях с различными сортами частиц складываются частоты столкновений, т.е. обратные длины свободного пробега $1/l_a = \sum n_b Q_{ab}^{(2.2)}$. Вязкость чистого газа может быть выражена формулой (10.44). Следовательно, вязкость смеси можно вычислить по приближенной формуле

$$\eta = \sum_a \eta_a = \frac{5T}{16} \sum_a \frac{m_a x_a}{\sum_b x_b \mu_{ab} \Omega_{ab}^{(2.2)}}. \quad (10.54)$$

Здесь $x_a = n_a/n$ - объемная доля частиц сорта a , $n = \sum n_a$ - концентрация частиц. Аналогично получается приближенная формула для теплопроводности газа

$$\lambda = \frac{75}{64T^2} \sum_a \frac{x_a}{\sum_b K_{ab} x_b \mu_{ab} \Omega_{ab}^{(2.2)}}, \quad (10.55)$$

здесь введены поправочные коэффициенты K_{ab} , учитывающие отклонение приближенных формул от точных при неравных массах частиц [167].

$$K_{ab} = 1 + \left(1 - \frac{m_a}{m_b}\right) \left(0.45 - 2.54 \frac{m_a}{m_b}\right) \left(1 + \frac{m_a}{m_b}\right)^2.$$

Взаимодействия сортов различных частиц обычно аппроксимируются одним из следующих потенциалов:

1. Обратно-степенной отталкивательный потенциал

$$U(r) = \frac{A}{r^n}$$

2. Потенциал Ленарда-Джонса (12-6)

$$U(r) = \Phi_0 \left[\left(\frac{r_m}{r}\right)^{12} - \left(\frac{r_m}{r}\right)^6 \right].$$

3. Потенциал Ленарда-Джонса с ядром

$$U(r) = 4\Phi_0 \left[\left(\frac{1-\gamma}{r/r_0 - \gamma}\right)^{12} - \left(\frac{1-\gamma}{r/r_0 - \gamma}\right)^6 \right].$$

4. Потенциал $(n-4)$

$$U(r) = \frac{n\Phi_0}{n-4} \left[\frac{4}{n} \left(\frac{r_m}{r}\right)^n - \left(\frac{r_m}{r}\right)^4 \right].$$

5. Потенциал 12-4 с ядром

$$U(r) = \frac{\Phi_0}{2} \left[\left(\frac{1-a^*}{r/r_m - a^*}\right)^{12} - 3 \left(\frac{1-a^*}{r/r_m - a^*}\right)^4 \right].$$

6. Потенциал Морзе

$$U(r) = \Phi_0 \left[e^{-2c(r-r_m)/r_0} - 2e^{-c(r-r_m)/r_0} \right].$$

7. Экспоненциальный потенциал

$$U(r) = Ae^{-r/\rho}.$$

8. Экранированный потенциал

$$U(r) = \pm \Phi_0 \frac{\rho}{r} e^{-r/\rho}.$$

Таблицы интегралов столкновений $\Omega^{(l,s)}$ для некоторых из этих потенциалов содержатся в [16], [67], [20].

10.3 Кинетические уравнения для системы заряженных частиц

В этой главе рассматриваются кинетические уравнения Ландау и Ленарда-Балеску для описания плазмы. Вначале приводится вывод интеграла столкновений Ландау основанный на уравнении Больцмана, как это было получено в оригинальной работе [36]. Затем эти интегралы столкновений получаются из цепочки Боголюбова с использованием поляризационного приближения. Из этого вывода можно определить границы применимости интегралов столкновения для плазмы. В заключение вычисляются коэффициенты переноса в ионизованном газе.

10.3.1 Интеграл столкновений Ландау

В теории кинетических уравнений интеграл столкновений Ландау получается независимо от уравнения Больцмана. Предположения, на которых основывается вывод интегралов столкновений для ионизованного газа, связаны с дальнедействующим характером кулоновского потенциала. Но как и для интеграла Больцмана полезно привести "феноменологический" вывод интеграла столкновений в плазме. Исходным положением при таком выводе является уравнение Больцмана, в котором, вследствие дальнедействующего характера кулоновских сил основную роль играют дальние столкновения, а не близкие, как для нейтрального газа. Движение заряженных частиц в плазме имеет вид непрерывный характер в фазовом пространстве в отличие от движения частиц в нейтральном газе, где за время столкновения резко изменяется импульс частицы. Вывод интеграла столкновений для плазмы из интеграла столкновений Больцмана не означает, что область применимости интеграла Ландау уже области применимости интеграла Больцмана. Запишем интеграл столкновений Больцмана в виде

$$I_a = \sum_b \int d^3 p_b d\omega W[f'_a f'_b - f_a f_b], \quad (10.56)$$

$d\omega$ - элемент телесного угла рассеяния. В выражении для вероятности перехода $W(\mathbf{p}'_a, \mathbf{p}'_b, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b)$ сделаем замену переменных, выразив импульсы после столкновения

через импульсы до столкновения и величину потери импульса Δ с учетом закона сохранения импульса при столкновении. Поскольку уравнения движения обратимы, вероятность перехода обладает свойством $W(\Delta) = W(-\Delta)$. Разложим W, f'_a, f'_b , входящие в (10.56) по величине импульса передаваемого при столкновении Δ :

$$\begin{aligned}
 W(\mathbf{p}'_a, \mathbf{p}'_b, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b) &= W\left(\frac{\mathbf{p}'_a + \mathbf{p}_a}{2}, \frac{\mathbf{p}'_b + \mathbf{p}_b}{2}, \mathbf{p}'_a - \mathbf{p}_a, \mathbf{p}'_b - \mathbf{p}_b\right) = W\left(\mathbf{p}_a + \frac{\Delta}{2}, \mathbf{p}_b - \frac{\Delta}{2}, \Delta, -\Delta\right). \\
 I_a &= \sum_b \int d\mathbf{p}_b d\omega \left[W + \frac{1}{2}\Delta \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_b} \right) W \right] \cdot \left[\left(1 + \Delta \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} + \frac{1}{2}\Delta\Delta : \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}_a \partial \mathbf{p}_a} \right) f_a \cdot \right. \\
 &\cdot \left. \left(1 - \Delta \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_b} + \frac{1}{2}\Delta\Delta : \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{p}_b \partial \mathbf{p}_b} \right) f_b - f_a f_b \right] = \sum_b \int d\mathbf{p}_b d\omega W \Delta \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_b} \right) f_a f_b + \\
 &\frac{1}{2} \sum_b \int d^3 p_b d\omega W \Delta \Delta : \left(\frac{\partial^2 f_a}{\partial \mathbf{p}_a \partial \mathbf{p}_a} f_b - 2 \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} \frac{\partial f_b}{\partial \mathbf{p}_b} + \frac{\partial^2 f_b}{\partial \mathbf{p}_b \partial \mathbf{p}_b} f_a \right) + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_b \int d^3 p_b d\omega \Delta \Delta : \left(\frac{\partial W}{\partial \mathbf{p}_a} - \frac{\partial W}{\partial \mathbf{p}_b} \right) \left(f_b \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} - f_a \frac{\partial f_b}{\partial \mathbf{p}_b} \right). \quad (10.57)
 \end{aligned}$$

Проинтегрируем по частям член, содержащий $\partial W / \partial \mathbf{p}_b$:

$$\begin{aligned}
 &-\frac{1}{2} \sum_b \int d^3 p_b d\omega \Delta \Delta : \frac{\partial W}{\partial \mathbf{p}_b} \left(f_b \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} - f_a \frac{\partial f_b}{\partial \mathbf{p}_b} \right) = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_b \int d^3 p_b d\omega W \Delta \Delta : \left(\frac{\partial f_b}{\partial \mathbf{p}_b} \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} - f_a \frac{\partial^2 f_b}{\partial \mathbf{p}_b \partial \mathbf{p}_b} \right).
 \end{aligned}$$

Подставляя в (10.57) получим

$$I_a = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} \cdot \frac{1}{2} \sum_b \int d^3 p_b d\omega W \Delta \Delta \cdot \left[f_b \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} - f_a \frac{\partial f_b}{\partial \mathbf{p}_b} \right]. \quad (10.58)$$

Потерю импульса при кулоновском рассеянии можно вычислить, используя метод вычисления рассеяния на малые углы [60]. В интеграл столкновений (10.58) входит тензор

$$D_{ik} = \frac{1}{2} \int d\omega W \Delta_i \Delta_k = \frac{1}{2} \int \Delta : \Delta_k u dQ. \quad (10.59)$$

Выберем систему координат, в которой ось x_1 направлена вдоль вектора относительной скорости \mathbf{u} . Потеря импульса вдоль оси x_1 , $\Delta_1 = 0$, т.к. до точки наибольшего сближения частица притягивается к силовому центру, а затем отталкивается. Вводя прицельное расстояние ρ и считая движение слабо отличающимся от прямолинейного, получаем

$$\Delta_2 = - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Phi}{\partial x_2} dt = \frac{\rho e^2}{u} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{(\rho^2 + x^2)^{3/2}},$$

здесь от интегрирования по t перешли к интегрированию по x

$$dt = \frac{dx}{v} = \frac{\rho d\varphi}{u \cos^2 \varphi}, \quad x = \rho \operatorname{tg} \varphi.$$

Интегрируя, получаем $\Delta_2 = 2e^2/\rho$. Введем вектор $\rho = (0, \rho, 0)$, тогда $\Delta = (2e^2/u\rho^2)\rho$, и тензор (10.59) выражается в виде

$$D_{ik} = \frac{2e^4}{u} \int \frac{\rho_i \rho_k}{\rho^4} dQ.$$

Дифференциальное сечение рассеяния равно $dQ = \rho d\rho d\varphi$. Отличные от нуля компоненты тензора D_{ik} равны

$$D_{yy} = D_{zz} = \frac{2\pi e^4}{u} \int_{\rho_1}^{\rho_2} \frac{d\rho}{\rho}.$$

Интеграл по прицельному расстоянию логарифмически расходится на близких и дальних расстояниях. Расходимости можно избежать, если в качестве нижнего прицельного расстояния выбрать амплитуду рассеяния $f = e^2/kT$, или величину, близкую к ней, определяющуюся тем прицельным расстоянием, при котором происходит расстояние на угол $\pi/2$. Это расстояние равно $f/3$. В качестве верхнего прицельного расстояния выбирают дебаевский радиус, т.к. на этом расстоянии экранируется потенциал выделенной частицы, на которой происходит рассеяние. В результате получаем:

$$D_{yy} = D_{zz} = \frac{2\pi e^4}{u} \ln \Lambda, \quad \Lambda = \frac{3r_D kT}{e^2} = \frac{3}{\Gamma},$$

где $\Gamma = e^2/kTr_D$ - параметр взаимодействия в плазме. В произвольной системе координат тензор D_{ik} определяется только вектором относительной скорости u_i , поэтому наиболее общий вид тензора

$$D_{ik} = \left(a \frac{u_i u_k}{u^2} + b \delta_{ik} \right) \frac{2\pi e^4}{u} \ln \Lambda.$$

Постоянные a и b могут быть найдены в системе координат $\mathbf{u}(u, 0, 0)$, в которой $D_{11} = 0$, D_{22} , $D_{33} \neq 0$. Следовательно, тензор D_{ik} равен

$$D_{ik} = \frac{2\pi e^4}{u} \ln \Lambda \left(\delta_{ik} - \frac{u_i u_k}{u^2} \right). \quad (10.60)$$

Подставляя (10.60) в (10.58) получаем интеграл столкновений Ландау

$$I_a = \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_a} \cdot \sum_b 2\pi e_a^2 e b^2 \ln \Lambda \int d^3 p_b \frac{1}{u} \left(\delta - \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}}{u^2} \right) \cdot \left(f_b \frac{\partial f_a}{\partial \mathbf{p}_a} - f_a \frac{\partial f_b}{\partial \mathbf{p}_b} \right). \quad (10.61)$$

10.3.2 Интеграл столкновений Ленарда-Балеску

Кулоновский потенциал взаимодействия заряженных частиц является дальнедействующим, поэтому в отличие от нейтрального газа, в плазме проявляются коллективные эффекты. Одним из таких эффектов является действие на каждую заряженную частицу эффективного поля, который создается всеми заряженными частицами, т.е. средой. В уравнении для корреляционной функции (10.16) в этих условиях необходимо удержать поляризационные члены, а в правой части использовать приближение вторых корреляционных функций. Для простоты рассмотрим однородный случай,

когда одночастичные функции распределения от координат не зависят, а корреляционные функции и потенциалы взаимодействия зависят от относительных координат. Система уравнений, определяющих поляризационное приближение следует из (10.15), (10.16)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial t} &= n \int \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_2} \right) g(x_1 x_2) dx_2, \\ \left[\frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{12}} \right] g(\mathbf{r}_{12}) &= \frac{1}{m} \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_{12}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_2} \right) f(\mathbf{v}_1) f(\mathbf{v}_2) + \\ &+ \frac{n}{m} \int \left[\frac{\partial \Phi_{13}}{\partial \mathbf{r}_{13}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_3} \right) f(\mathbf{v}_1) g(\mathbf{r}_{23}, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3) - \frac{\partial \Phi_{23}}{\partial \mathbf{r}_{23}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_2} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_3} \right) f(\mathbf{v}_2) g(\mathbf{r}_{13}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3) \right]. \end{aligned} \quad (10.62)$$

Здесь учтено, что в однородном случае

$$\Theta_{12} = \frac{1}{m} \left(\frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_1} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} + \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_2} \right) = \frac{1}{m} \frac{\partial \Phi_{12}}{\partial \mathbf{r}_{12}} \cdot \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_2} \right), \quad (10.63)$$

$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ - относительная координата частиц 1,2. Далее будем использовать пространственное преобразование Фурье

$$F(\mathbf{r}) = \int F(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}, \quad F(\mathbf{k}) = \int F(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (10.64)$$

Условие, аналогичное условию ослабления корреляций в нейтральном газе и вызывающее необратимость в системе для системы заряженных частиц будем выражать в виде затухания корреляционной функции при $t \rightarrow \infty$. С учетом преобразования Фурье (10.64) будем рассматривать следующий вид корреляционной функции

$$g(t, x_1, x_2) = \lim_{\delta \rightarrow 0} e^{-\delta t} \int e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{12}} g(\mathbf{k}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (10.65)$$

Для преобразования уравнения (10.63) учтем, что $\mathbf{r}_{12} + \mathbf{r}_{23} + \mathbf{r}_{31} = 0$, обозначим $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}$, $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}'$, $\mathbf{r}_{23} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ и рассмотрим уравнение

$$\mathbf{a} \cdot \nabla g_{12}(r) = \int \mathbf{b} \cdot \nabla' \Phi(\mathbf{r}') g_{23}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (10.66)$$

Выполним в (10.66) преобразование Фурье

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{a} g_{12}(\mathbf{k}) = \int \mathbf{b} \cdot \mathbf{k}' \Phi(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}' - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} g_{23}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

Вычитая и прибавляя $i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}$ в показателе экспоненты, выделим часть интеграла, соответствующую преобразованию Фурье $g_{23}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. После преобразований получим спектральную формулу уравнения (10.66)

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \mathbf{a} g_{12}(\mathbf{k}) &= \int \mathbf{b} \cdot \mathbf{k}' \Phi(\mathbf{k}') g_{23}(\mathbf{k}') e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{k}' - \mathbf{k})} \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} d\mathbf{r} = \\ &= \int \mathbf{b} \cdot \mathbf{k}' \Phi(\mathbf{k}') g_{23}(\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) d^3 k' = \mathbf{b} \cdot \mathbf{k} \Phi(k) g_{23}(k). \end{aligned}$$

Фактически здесь доказана теорема о свертке для преобразования Фурье уравнения (10.66). С учетом (10.65) находим спектральную форму уравнения для корреляционной функции

$$g(\mathbf{k}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) = \frac{\Phi(k)\mathbf{k}}{m[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - i0]} \cdot \left\{ \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_1} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_2} \right) f(\mathbf{v}_1)f(\mathbf{v}_1) + \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial \mathbf{v}_1} n \int g(\mathbf{k}, \mathbf{v}_3, \mathbf{v}_2, t) d\mathbf{v}_2 - \frac{\partial f(\mathbf{v}_2)}{\partial \mathbf{v}_2} n \int g(\mathbf{k}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3, t) d\mathbf{v}_3 \right\}. \quad (10.67)$$

Выражение, содержащее $i0$ понимается как предел $f(\xi + i0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} f(\xi + i\delta)$ при $\delta \rightarrow 0$. В кинетическое уравнение, а также правую часть уравнения (10.67) входят интегралы корреляционных функций, поэтому введем обозначение

$$G(t, \mathbf{k}, \mathbf{v}_1) \equiv G_1 = n \int g(t, \mathbf{k}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, t) d\mathbf{v}_2. \quad (10.68)$$

Умножая на плотность и интегрируя по \mathbf{v}_2 уравнение (10.67), получаем

$$G_1 = \int \frac{\Phi(k)\mathbf{k}}{m[\mathbf{k} \cdot (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - i0]} \cdot \left\{ f(\mathbf{v}_2) \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial \mathbf{v}_1} - f(\mathbf{v}_1) \frac{\partial f(\mathbf{v}_2)}{\partial \mathbf{v}_2} + G_2^* \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial \mathbf{v}_1} - G_1 \frac{\partial f(\mathbf{v}_2)}{\partial \mathbf{v}_2} \right\} d\mathbf{v}_2. \quad (10.69)$$

Определим одномерную функцию распределения по продольным скоростям $u = \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}/k \equiv v_{\parallel}$ вдоль волнового вектора, поперечные скорости будем обозначать v_{\perp}

$$\mathbf{f}(u) = \int f(\mathbf{v}) d^2 v_{\perp} = \int f(\mathbf{v}) \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v} - ku) d\mathbf{v}. \quad (10.70)$$

После интегрирования правой части по поперечным скоростям $v_{2\perp}$ из (10.69) получаем

$$G_1 = \int \frac{k\Phi(k)}{m[k(u_2 - u_1) - i0]} \cdot \left\{ \bar{f}(u_2) \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial u_1} - f(\mathbf{v}_1) \frac{\partial \bar{f}(u_2)}{\partial u_2} + \bar{G}_2^* \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial u_1} - G_1 \frac{\partial \bar{f}(u_2)}{\partial u_2} \right\} du_2. \quad (10.71)$$

Проинтегрируем это равенство по поперечным скоростям $v_{1\perp}$:

$$\bar{G}_1 = \int \frac{k\Phi(k)}{m[k(u_2 - u_1) - i0]} \cdot \left\{ \bar{f}(u_2) \frac{\partial \bar{f}(u_1)}{\partial u_1} - \bar{f}(u_1) \frac{\partial \bar{f}(u_2)}{\partial u_2} - \bar{G}_2^* \frac{\partial \bar{f}(u_1)}{\partial u_1} - \bar{G}_1 \frac{\partial \bar{f}(u_2)}{\partial u_2} \right\} du_2. \quad (10.72)$$

Исключим G_2^* , для этого умножим (10.71) на $\partial f(u_1)/\partial u_1$, (10.71) на $\partial f(\mathbf{v}_1)/\partial u_1$ и вычтем их:

$$\begin{aligned} & \left[G_1 \frac{\partial f(u_1)}{\partial u_1} - \bar{G}_1 \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial u_1} \right] [1 + \Phi(k)\chi(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1)] = \\ & = \Phi(k)\chi(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1) \left[f(\mathbf{v}_1) \frac{\partial f(u_1)}{\partial u_1} - f(u_1) \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial u_1} \right]. \end{aligned}$$

Здесь введена функция

$$\chi(\mathbf{k}, \omega) = \int \frac{\mathbf{k}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 + i0} \cdot \frac{\partial f(v_2)}{\partial \mathbf{v}_2} d\mathbf{v}_2, \quad (10.73)$$

которая может быть вычислена с помощью формулы Сохоцкого:

$$\frac{1}{x \pm i0} = P \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x), \quad (10.74)$$

применяя которую, находим мнимую часть

$$\text{Im} \chi(k, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}) = - \int \pi k \frac{\partial f(u_2)}{\partial u_2} \delta(ku_2 - ku_1) du_2 = -\pi \frac{\partial f(u_1)}{\partial u_1}. \quad (10.75)$$

Из (10.72) следует, что функция \bar{G}_1 однозначно определяется функцией $\bar{f}(u)$ и не имеет мнимой части. Взяв мнимую часть уравнения (10.72), получим

$$\text{Im} G_1 \frac{\partial f(u_1)}{\partial u_1} = \frac{\Phi(k) \text{Im} \chi(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})}{|\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v})|^2} \left[f(\mathbf{v}_1) \frac{\partial f(u_1)}{\partial u_1} - f(u_1) \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial u_1} \right], \quad (10.76)$$

где диэлектрическая проницаемость определяется формулой

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \Phi(k) \chi(\mathbf{k}, \omega). \quad (10.77)$$

В кинетическом уравнении (10.72) член, содержащий $\partial/\partial \mathbf{p}_2$ после интегрирования по \mathbf{p}_2 обращается в нуль. Выполняя в оставшейся части преобразование Фурье, получим

$$\frac{\partial f(\mathbf{p}_1)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{p}_1),$$

где поток в пространстве импульсов равен

$$\mathbf{J}(\mathbf{p}_1) = \int i\mathbf{k} \Phi(\mathbf{k}) n g(\mathbf{k}, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) d\mathbf{v}_2 \frac{d^3 k}{(2\pi)^3},$$

т.е. определяется мнимой частью функции G_1 . Подставляя (10.76) с учетом (10.75) и (10.70) в форме

$$f(u_1) = k \int f(v_2) \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2) d\mathbf{v}_2,$$

получаем

$$\mathbf{J}(\mathbf{p}_1) = \pi \int \frac{\Phi^2(k) \mathbf{k} k \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2)}{|\varepsilon(\mathbf{k}, \mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1)|^2} \cdot \left[f(\mathbf{v}_2) \frac{\partial f(\mathbf{v}_1)}{\partial \mathbf{v}_1} - f(\mathbf{v}_1) \frac{\partial f(\mathbf{v}_2)}{\partial \mathbf{v}_2} \right] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}.$$

Выражение для потока можно записать в более симметричной форме, если ввести дополнительное интегрирование. В результате получим окончательную форму кинетического уравнения плазмы, найденную Ленардом [125] и Балеску [79]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_1} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{p}_1),$$

где поток в пространстве импульсов

$$\mathbf{J}(\mathbf{p}_1) = \pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{\Phi^2(k) \mathbf{k} k \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_1 - \omega) \delta(\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_2 - \omega)}{|\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)|^2}.$$

$$\cdot \left[f(\mathbf{p}_2) \frac{\partial f(\mathbf{p}_1)}{\partial \mathbf{p}_1} - f(\mathbf{p}_1) \frac{\partial f(\mathbf{p}_2)}{\partial \mathbf{p}_2} \right] \frac{d^3 k}{(2\pi)^3}. \quad (10.78)$$

Обсудим смысл выражения $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$. Фурье - образ кулоновского потенциала имеет вид $\Phi(q) = 4\pi e^2/q^2$, подставляя который в (10.77) с учетом (10.73) получаем

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1 + \frac{4\pi e^2}{mk^2} \int \frac{\mathbf{k}}{\omega - \mathbf{k} \cdot \mathbf{v} + i0} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{v})}{\partial \mathbf{v}}. \quad (10.79)$$

Аналогичное выражение для диэлектрической проницаемости было найдено при решении уравнения Власова [45]. Диэлектрическая проницаемость дает связь между электрической индукцией $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ т.е. полем, создаваемым внешними (сторонними) зарядами ($\nabla \cdot \mathbf{D} = 4\pi \rho_{\text{ст}}$) и внутренним электрическим полем с $\mathbf{E}(\mathbf{k}, \omega)$, имеющим неоднородностью $\lambda = 2\pi/k$ и частоту ω непосредственно действующими на заряды, \mathbf{E} зависит от поляризации плазмы (\mathbf{P} - вектор поляризации):

$$\mathbf{E} = \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{D} = \mathbf{D} - 4\pi \mathbf{P}.$$

Полюсы функции $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ определяют спектр собственных колебаний плазмы.

Найдем предельное значение диэлектрической проницаемости плазмы для высоких и низких частот. При высоких частотах $\omega \rightarrow \infty$, интеграл в (10.79) становится несущественным и $\varepsilon \rightarrow 1$. Это означает, что если внешнее поле высокочастотное (меняется с частотой, больше плазменной частоты $\omega \gg \omega_p = (4\pi n e^2/m)^{1/2}$), электроны "не успевают" перестроиться и создать поле поляризации. В другом предельном случае $\omega \rightarrow 0$ интеграл вычисляется, его вещественная часть определяется функцией распределения электронов по энергиям, которую будем считать максвелловской. Вычисление интеграла дает

$$\frac{4\pi e^2}{mk^2} \int \frac{\mathbf{k}}{\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}} \cdot \frac{m\mathbf{v}}{kT} f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = \frac{\kappa^2}{k^2},$$

где $\kappa^2 = 4\pi n e^2/kT = r_D^{-2}$, r_D - дебаевский радиус. Следовательно, в предельных случаях получаем

$$\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \rightarrow 1, \quad \omega \rightarrow \infty, \quad \varepsilon(\mathbf{k}, \omega) \rightarrow 1 + (k^2 r_D^2)^{-1}, \quad \omega \rightarrow 0. \quad (10.80)$$

В статическом пределе $\omega \rightarrow 0$ происходит экранировка внешнего поля на расстояниях порядка дебаевского радиуса, т.к.

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{D}}{\varepsilon(\mathbf{k})} = \frac{k^2}{k^2 + \kappa^2} \mathbf{D},$$

а фурье - образу $k^2/(k^2 + \kappa^2)$ отвечает экранированный потенциал $\tilde{\Phi} = (1/r)e^{-\kappa r}$. Для промежуточных частот $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ описывает динамическую поляризацию среды, когда при быстром движении заряд "уходит" от экранирующего его "облака". Если полностью пренебречь эффектами поляризации среды и в интеграле Ленарда-Балеску (10.78) положить $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 1$, получим интеграл столкновений Ландау. Интеграл столкновений (10.78) при $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega) = 0$ легко преобразовать к виду (10.61). Отметим, что в интеграле столкновений Ленарда-Балеску расходимость на верхнем пределе

интегрирования исчезает, т.к. диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega)$ учитывает дебаевское экранирование (10.80).

Приведем также простой квантово-механический способ получения уравнения Ленарда-Балеску [163]. При взаимодействии частиц с импульсами $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и $\mathbf{p}' = \hbar\mathbf{k}'$ происходит передача импульса от одной частицы к другой во время взаимодействия, ($\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$ - волновые числа). Интеграл столкновения для функции распределения в пространстве импульсов $f(\mathbf{p})$, учитывая определение вероятности перехода W_{kq} , равен

$$I[f(\mathbf{p})] = - \int \frac{d^3 k' d^3 q'}{(2\pi)^6} W_{kq} [f(\mathbf{p})f(\mathbf{p}') - f(\mathbf{p} + \hbar\mathbf{q})f(\mathbf{p}' - \hbar\mathbf{q})].$$

Вероятность перехода в квантовой механике определяется "золотым правилом"

$$W_{kq} = \frac{2\pi}{\hbar} |\tilde{\Phi}(\mathbf{q}, \omega)|^2 \delta(E_{k+q} + E_{k'+q} - E_k - E_{k'}).$$

Здесь взаимодействие частиц описывается экранированным потенциалом, фурье-образ которого

$$\tilde{\Phi}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(q, \omega)}. \quad (10.81)$$

Переходя от функции распределения по импульсам к функции распределения по скоростям с учетом равенств

$$\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 d\mathbf{v}', \quad E_{k+q} - E_k = \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{v} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m},$$

получаем интеграл столкновений

$$I[f(p)] = -\frac{4ne^4}{\hbar^2} \int d\mathbf{v}' dq \frac{\delta[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') + \hbar q^2/m]}{q^4 |\varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q} \cdot \mathbf{v} + \hbar q^2/2m)|^2} [f(v)f(v') - f(\mathbf{v} + \hbar\mathbf{q}/m)f(\mathbf{v} - \hbar\mathbf{q}/m)],$$

или, переходя к классическому пределу $\hbar \rightarrow 0$

$$\delta\left[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}') + \frac{\hbar q^2}{m}\right] = \left(1 + \frac{\hbar}{m} \mathbf{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\right) \delta[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{v}')],$$

$$\frac{1}{|\varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q} \cdot \mathbf{v} + \hbar q^2/2m)|^2} = \left(1 + \frac{\hbar}{2m} \mathbf{q} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}\right) \frac{1}{|\varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{q} \cdot \mathbf{v})|^2},$$

получаем интеграл столкновений Ленарда-Балеску.

При выводе плазменных кинетических уравнений использовались предположения об ослаблении корреляции и малости времени взаимодействия, по сравнению со временем изменения одночастичной функции распределения. Характерное время распределения частиц в плазме определяется расстоянием наименьшего сближения частиц, т.е. получается приравниванием кинетической и потенциальной энергии. Это расстояние $f = e^2/kT$ - амплитуда кулоновского рассеяния, которая мала по сравнению с дебаевским радиусом для идеальной плазмы [60]. Если учесть запаздывание, то получаются поправки в выражениях для термодинамических функций, а в коэффициенты переноса и решения стационарных задач они вклада не дают [29].

10.3.3 Иерархия кинетических уравнений

В предыдущих параграфах весьма кратко были изложены вопросы обоснования кинетических уравнений. Для того, чтобы ориентироваться в большом количестве кинетических уравнений нейтральных газов и плазмы, полезно иметь общую логическую картину получения кинетических уравнений, областей применимости и т.д. Если отвлечься от задач теории сильно разреженных газов и плазмы, где неприменимо гидродинамическое приближение, к таким задачам относятся аэродинамика течений с числами Кнудсена порядка 1, т.е. когда длина пробега молекул сравнима с размерами тела, а также задачи разреженной, "бесстолкновительной" плазмы, поведение которой описывается уравнением Власова [45], а рассматривать вопросы кинетической теории с точки зрения низкотемпературной плотной (столкновительной) плазмы, то возникают следующие задачи. В равновесной низкотемпературной плазме, которая состоит из смеси нейтральных и заряженных частиц различных сортов, для замыкания уравнений гидродинамики необходимы выражения для потоков массы, вещества, заряда [25], которые связаны с термодинамическими силами через коэффициенты переноса. Поэтому первая задача состоит в вычислении коэффициентов переноса. Вторая задача кинетической теории заключается в описании неравновесных явлений, когда энергия вкладывается в один сорт частиц (электроны при электрическом нагреве, или тяжелые частицы при нагреве в ударной волне), а затем перераспределяется вследствие столкновений. На рис.(10.6) изображена схема получения ки-



Рис. 10.6: Иерархия кинетических уравнений

нетических уравнений, с помощью которых могут быть вычислены коэффициенты переноса и решены задачи неравновесной плазмы. Исходным пунктом является уравнение Лиувилля (10.7), из которого следует цепочка Боголюбова. При учете 3-х, 4-х, ... и т.д. столкновений могут быть получены кинетические уравнения с плотностными

поправками. Если пренебречь тройными столкновениями, то для нейтральных газов с короткодействующими потенциалами в пренебрежении запаздыванием получается уравнение Больцмана (10.22), а если учесть запаздывание, то появляется поправка Климонтовича. Из уравнения Больцмана может быть получено еще более простое приближение Бхатнагара-Гросса-Крука (ВГК) (τ - приближение). Для плазмы из цепочки Боголюбова можно получить поляризационное приближение (10.62), (10.63), из которого следуют уравнения Ленарда-Балеску и Ландау. Из всех описанных кинетических уравнений могут быть получены коэффициенты переноса. Из схемы вывода кинетических уравнений следует, что почти все они не могут описать явлений переноса в плотных газах или плазме, поскольку не учитывают многочисленные корреляции. Однако такой способ получения коэффициентов переноса, когда из уравнения Лиувилля выводится сначала кинетическое уравнение, а из него вычисляются коэффициенты переноса, не является единственным. Существует другой способ, в котором из уравнения Лиувилля непосредственно можно получить коэффициенты переноса. Этот метод основан на связи коэффициентов переноса с временными корреляционными функциями (ВКФ). В принципе метод ВКФ не содержит ограничений на плотность частиц и величину взаимодействия, однако вычисление ВКФ - задача не менее сложная, чем получение и решение кинетического уравнения. Метод ВКФ позволяет вычислять коэффициенты переноса моделированием системы N взаимодействующих частиц меньшим числом частиц с последующим решением уравнений движения отдельных частиц. Этот способ численного моделирования движения частиц называется молекулярной динамикой. В результате численного решения такой модельной системы находятся траектории движения всех частиц системы в фазовом пространстве, поэтому можно вычислить ВКФ и коэффициенты переноса. В методе ВКФ возможно получение уравнений ВКФ, из которых могут быть получены кинетические уравнения - это еще одна область кинетической теории. Метод ВКФ имеет существенное ограничение, связанное с тем, что рассматриваются малые отклонения от равновесного состояния, но с произвольной величиной взаимодействия. В кинетических уравнениях наоборот, предполагается малым, взаимодействие или плотность частиц, но могут рассматриваться случаи сильно неравновесные, такие, как двухтемпературная плазма. В области где одновременно могут применяться метод ВКФ и кинетические уравнения, они дают одинаковые результаты.

10.3.4 Коэффициенты переноса ионизованных газов

В ионизованном газе по сравнению с нейтральными появляются новые коэффициенты переноса, связанные с переносом заряда и тепла легкими подвижными частицами - электронами. Для вычисления этих коэффициентов необходимо решить кинетическое уравнение для электронов с учетом столкновений электронов с атомами, ионами и электронами. Учет электрон-электронных столкновений сильно усложняет решение задачи, потому что соответствующий интеграл столкновений является нелинейным. Наиболее просто коэффициенты переноса в ионизованном газе вычисляются для модели Лоренца, в которой учитываются только столкновения электронов с тяжелыми частицами и газ является слабоионизованным, т.е. используются приближения

$$m \ll M, \quad n_e \ll n_a.$$

Здесь m, M - массы электронов и атомов, n_e, n_a - их концентрации. Рассмотрим стационарный пространственно однородный случай. Кинетическое уравнение Больцмана для электронов в электрическом поле \mathbf{E} имеет вид:

$$-\frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \int (f' f'_a - f f_a) |\mathbf{v} - \mathbf{v}_a| dQ d^3 v_a, \quad (10.82)$$

f, f_a функции распределения электронов и атомов, dQ - дифференциальное сечение рассеяния электронов на атомах. Функция распределения атомов удовлетворяет условию нормировки

$$\int f_a d^3 v_a = \int f'_a d^3 v'_a = n_a. \quad (10.83)$$

В этом равенстве учтено, что при столкновениях электрона с атомом скорость атома изменяется мало, энергия электрона также изменяется незначительно, происходит только изменение импульса электрона, т.е. $|\mathbf{v}'| \approx |\mathbf{v}|$. Относительная скорость частиц $|\mathbf{v} - \mathbf{v}_a| \approx v$. Интегрирование (10.82) по \mathbf{v}_a дает

$$-\frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = n_a \int [f(\mathbf{v}') - f(\mathbf{v})] v dQ.$$

Выберем систему координат, в которой ось z совпадает с вектором \mathbf{E} , а вектор \mathbf{v} лежит в плоскости oxz . Будем искать функцию распределения электронов в виде

$$f(\mathbf{v}) = f_0(v) + v_z f_1(v). \quad (10.84)$$

В равновесной плазме $f_0(v)$ - максвелловская функция распределения (10.27). Подставляя в (10.83), получим:

$$-\frac{eE}{m} \frac{\partial}{\partial v_z} (f_0 + v_z f_1) = n_a v f_1(v) \int (\cos \alpha' - \cos \alpha) dQ. \quad (10.85)$$

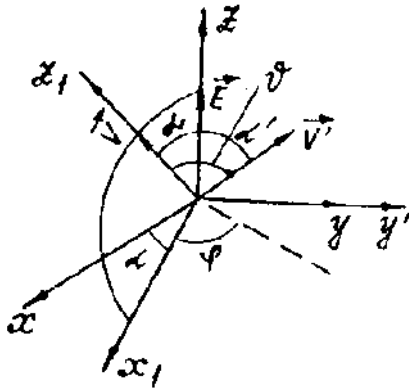


Рис. 10.7: Сферические координаты в задаче о рассеянии частиц

Проинтегрируем (10.85) по азимутальному углу рассеяния φ , в системе координат $Ox_1y_1z_1$, где компоненты векторов имеют вид:

$$\mathbf{v}(0, 0, v), \quad \mathbf{E}(-E \sin \alpha, 0, E \cos \alpha),$$

$$\mathbf{v}'(v \sin \vartheta \cos \varphi, v \sin \vartheta \sin \varphi, v \cos \vartheta),$$

$$\cos \alpha' = \cos \alpha \cos \vartheta + \sin \alpha \sin \vartheta \cos \varphi.$$

В результате получаем

$$\int (v'_z - v_z) dQ = -v \cos \alpha \int (1 - \cos \vartheta) dQ = -v_z Q_m(v),$$

где $Q_m(v)$ - транспортное сечение рассеяния (10.38). Подстановка в кинетическое уравнение (10.85) дает

$$-\frac{eE}{m} \left(\frac{\partial f_0}{\partial v} \frac{v_z}{v} + f_1 + v_z \frac{\partial f_1}{\partial v} \frac{v_z}{v} \right) = -v_z Q_m N_a v f_1(v) = -v_z \nu_m(v) f_1(v).$$

Умножая полученное выражение на $v_z/v = \cos \vartheta$ и интегрируя по углам ϑ , получаем выражение для добавки к равновесной функции распределения

$$f_1(v) = \frac{eE}{m\nu\nu_m} \frac{\partial f_0}{\partial v}. \quad (10.86)$$

С помощью этой неизотропной части функции распределения вычислим плотность тока. Изотропная часть в ток вклада не дает, поэтому

$$j = j_z = - \int ev_z f(\mathbf{v}) d\mathbf{v} = -\frac{e}{3} \int v^2 \frac{eE}{m\nu\nu_m} \frac{\partial f_0}{\partial v} dv.$$

Из этого выражения определяется электропроводность газа как коэффициент пропорциональности между током и электрическим полем

$$\sigma = \frac{4\pi e^2}{3m} \int_0^\infty \frac{v^3}{\nu_m} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial v} \right) dv. \quad (10.87)$$

Аналогично проводится в модели Лоренца вычисление теплопроводности и термоэдс газа. Как и в теории нейтральных газов, считаем функцию распределения локально-равновесной, максвелловской с параметрами распределения $n(\mathbf{r}, t)$, $T(\mathbf{r}, t)$. В левую часть кинетического уравнения следует подставить равновесную функцию распределения, тогда, аналогично (10.83) получим уравнение, определяющее добавку к равновесной функции распределения:

$$\left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{v} \cdot \nabla \ln T - \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = -\nu_m f_1(\mathbf{v}).$$

В результате вместо (10.86) получаем:

$$f_1(\mathbf{v}) = -\frac{1}{\nu_m} \left[\left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) \mathbf{v} \cdot \nabla \ln T - \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \right]. \quad (10.88)$$

Из уравнения (10.88) следуют выражения для плотности тока и теплового потока:

$$\mathbf{j} = \sigma(\mathbf{E} + \alpha \nabla T), \quad \mathbf{q} = -\lambda_e \nabla T - \beta \mathbf{E} - \frac{5}{2} \frac{kT}{e} \mathbf{j}, \quad (10.89)$$

где коэффициенты теплопроводности λ_e и термоэдс α определяются выражениями

$$\lambda_e = \frac{4\pi}{3} n_e \int_0^\infty \left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right)^2 \frac{v^3}{\nu_m} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial v} \right) dv, \quad (10.90)$$

$$\alpha = \frac{1}{e} \int_0^\infty \left(\frac{mv^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right)^2 \frac{v^3}{\nu_m} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial v} \right) dv / \int_0^\infty \frac{v^3}{\nu_m} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial v} \right) dv. \quad (10.91)$$

Коэффициенты α и β связаны соотношением $\beta = \sigma \alpha T$, что является частным случаем принципа симметрии Онсагера кинетических коэффициентов [25]. В выражения для коэффициентов переноса входит транспортная частота упругих столкновений, которая для смеси газов равна $\nu_m = \sum_a n_a \nu_{mea}(v)$. Для полностью ионизованной плазмы необходимо решать кинетическое уравнение с учетом электрон-электронных столкновений

$$-\frac{eE}{m} \frac{\partial f}{\partial v} = I_{ee} + I_{ee}.$$

Если выбрать интеграл столкновений в форме Ландау, то для добавки к равновесной функции распределения после преобразований получается уравнение

$$-\frac{eE}{nQkT} = F(u)\hat{L}\chi(u) + \chi(u). \quad (10.92)$$

Здесь сечение рассеяния заряженных частиц

$$Q(v) = \pi \left(\frac{2e^2}{mv^2} \right)^2 \ln \Lambda,$$

$u = mv^2/kT$, а функции $F(x)$ и оператор $\hat{L}\varphi$ определяются уравнениями [155]

$$F(u) = \frac{1}{2}[\Phi(\sqrt{u} - \sqrt{u}\Phi'(\sqrt{u}))],$$

$$L\chi = 4u\chi'' + 4u \left[\frac{u^{1/2}\Phi'(u^{1/2})}{2F(u)} - 1 \right] \chi' + \left[\frac{1}{u} - \frac{\Phi(u^{1/2}) - 2u^{3/2}\Phi'(u^{1/2})}{F(u)} \right] \chi$$

$$- \frac{8}{3\pi^{1/2}F(u)} \left\{ u^{1/2}I_3(u) - 1, 2u^{1/2}I_5(u) + u^2(1 - 1, 2u)[I_0(\infty) - I_0(u)] \right\}.$$

Здесь $\Phi(x)$ - функция ошибок, а интегралы I_n являются моментами функции распределения

$$\Phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt, \quad I_n(x) = \int_0^x t^{\frac{n-1}{2}} e^{-t} dt.$$

Дифференциальное уравнение (10.92) было решено численно Спитцером и Хэрмом [155] и вычислены поправки на электрон-электронные столкновения к формулам Лоренца:

$$\gamma_\sigma = \frac{\sigma}{\sigma_L} = 0.582, \quad \gamma_\alpha = \frac{\alpha}{\alpha_L} = 0.469, \quad \gamma_\lambda = \frac{\lambda}{\lambda_L} = 0.225.$$

В числителе этих формул содержатся коэффициенты переноса плазмы с учетом электрон-электронных столкновений, а в знаменателе - соответствующие выражения для газа Лоренца. Все параметры $\gamma_\sigma, \gamma_\alpha, \gamma_\lambda < 1$, т.е. межэлектронные столкновения уменьшают коэффициенты переноса. В электрическом поле вначале сферически симметричная функция распределения "вытягивается" вдоль поля, электрон-электронные столкновения симметризируют функцию распределения в пространстве скоростей, что приводит к уменьшению коэффициентов переноса. В практических расчетах электронных коэффициентов переноса используется интерполяционный метод Фроста [102], в котором частота столкновений имеет вид

$$\nu = \sum n_a \nu_{mea} + \gamma^{-1} \nu_{mei}, \quad (10.93)$$

где транспортная электрон-ионная частота столкновений

$$\nu_{mei} = \frac{2}{3} n_i (8kT/\pi m)^{1/2} \pi (Ze^2/kT)^2 \ln \Lambda.$$

При вычислении проводимости подставляется γ_σ , и т.д. в формулы Лоренца с частотой (10.93), которые дают правильные выражения для слабоионизованной плазмы в пределах слабо- и полностью ионизованной плазмы. В промежуточных случаях

ошибка обычно невелика, если только в сечениях упругого рассеяния электронов нет аномального поведения типа эффекта Рамзауера или резонансного рассеяния. Приведем приближенные формулы для расчета электропроводности и теплопроводности полностью ионизованной плазмы:

$$\sigma^{-1} = \sigma_{ei}^{-1} + \sigma_{ea}^{-1}, \quad \sigma_{ei} = \frac{n_e e^2}{m \nu_{ei}} \frac{156 \cdot 10^{-6} T^{3/2}}{\ln \Lambda}, \quad \sigma_{ea}^{-1} = 2.40 \cdot 10^{-3} T^{1/2} \sum \frac{n_a}{n_e} Q_{ea}(A^2) \text{ Ом} \cdot \text{см}, \quad (10.94)$$

$$\lambda^{-1} = \lambda_{ei}^{-1} + \lambda_{ea}^{-1}, \quad \lambda_{ei} = \frac{4.6 \cdot 10^{-6} T^{5/2}}{\ln \Lambda}, \quad \lambda_{ea} = 0,0572 \frac{n_e}{n_a Q_{ea}(A^2)} \text{ ВТ/см} \cdot \text{К}. \quad (10.95)$$

В полученные выражения для электронных коэффициентов переноса входит кулоновский логарифм $\ln \Lambda$, который в уравнении Ландау был получен в результате обрезания логарифмически расходящихся интегралов. Рассмотрим результаты вычисления транспортного сечения рассеяния электронов для различных кинетических уравнений, описывающих плазму. При вычислении транспортного сечения рассеяния на малые углы с использованием резерфордовского сечения классического рассеяния с последующим обрезанием интеграла на расстояниях $f/3$ и r_D получается

$$Q_{mei}(v) = \pi f^2 \ln \Lambda, \quad f = \frac{2e^2}{mv^2}. \quad (10.96)$$

Взаимодействие частиц в плазме можно описывать дебаевским потенциалом. Если и рассеяние частиц также вычислять в дебаевском потенциале, то в борновском приближении сечение рассеяния определяется формулой, которая следует из выражения для вероятности перехода (10.61) и определения сечения рассеяния:

$$dQ_{ea} = |\Phi(q)|^2 d\omega.$$

Выражая угол рассеяния через изменение импульса $\hbar q = \hbar \mathbf{k}' - \hbar \mathbf{k}$, учитывая, что $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$, получаем $q = 2p \sin \vartheta/2$ и транспортное сечение рассеяния равно

$$Q_{ei}^{(1)} = \pi f^2 \int (1 - \cos \vartheta) dQ = \pi f^2 \int_0^q \frac{q^3 dq}{(q^2 + \kappa^2)^2}. \quad (10.97)$$

Предполагая, что максимальная передача импульса соответствует рассеянию частицы на угол $\pi/2$, получаем $q_{max} = 3/f$. Вычисление интеграла (10.97) приводит к следующему выражению для сечения рассеяния:

$$Q_{ei}^{(1)} = \frac{\pi}{2} f^2 \left[\ln(1 + \Lambda^2) - \frac{\Lambda^2}{1 + \Lambda^2} \right].$$

Это выражение формально не расходится при $\Lambda \rightarrow 0$ в отличие от (10.96). Предел $\Lambda \rightarrow 0$ соответствует неидеальной плазме, в которой условия применимости кинетической теории не выполняются. Рассмотрим еще выражение для сечения электронного рассеяния, которое получается при решении уравнения Ленарда-Балеску. При решении уравнения Ленарда-Балеску методом Чемпмена-Энскога при вычислении $\Omega^{(e,s)}$ интегралов частота столкновений с учетом квантовых эффектов (10.81) имеет вид:

$$\nu_{LB} = \frac{n}{12\pi^2 m^{1/2} T^{3/2}} \int_0^\infty dq q^3 e^{-\frac{\hbar^2 q^2}{8mkT}} \int_{-\infty}^\infty dz \left| \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(q, z)} \right|^2 e^{-z^2/2}. \quad (10.98)$$

Диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(q, \omega)$ дается выражением (10.79)

$$\varepsilon(q, z) = 1 + \frac{\kappa^2}{q^2}(A + iB), \quad (10.99)$$

$$A(z) = 2 - ze^{-z^2/2} \int_0^z e^{t^2/2} dt, \quad B(z) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} ze^{-z^2/2}.$$

Подставляя (10.99) в (10.98), выполняя интегрирование и используя выражение для частоты столкновений (10.93), находим выражение кулоновского логарифма для интеграла Ленарда-Балеску

$$(\ln \Lambda)_{LB} = \int_0^\infty \frac{q^3 e^{-1/4} \eta^2 q^2 dq}{(q^2 + 1)(q^2 + 2)} = \ln \frac{1}{\eta} - \frac{C}{2} + O(\eta^2 \ln \eta), \quad (10.100)$$

$C = 0,5772\dots$ - постоянная Эйлера. Здесь малый параметр η является отношением длины тепловой волны де Бройля электрона к дебаевскому радиусу:

$$\eta = \left(\frac{\hbar^2}{8r_D m k T} \right)^{1/2} \sim \frac{\lambda_T}{r_D}.$$

Для интеграла Ландау из (10.98) при $\varepsilon = 1$ аналогично, получаем

$$(\ln \Lambda)_L = \int \frac{q^3 e^{-1/4} \eta^2 q^2}{(q^2 + 2)^2} dq = \ln \frac{1}{\eta} - \frac{C}{2} + \frac{1}{2} \ln 2 - \frac{1}{2} + O(\eta^2).$$

Иногда в теории кинетических уравнений используется приближение Хаббарда [107], в котором интеграл столкновений является комбинацией интегралов столкновений Больцмана I_B , Ландау I_L и Ленарда-Балеску I_{LB} :

$$I = I_{LB} - I_L + I_B.$$

Такая комбинация интегралов столкновений приводит к выражениям для коэффициентов переноса, содержащим кулоновский логарифм

$$(\ln \Lambda)_H = (\ln \Lambda)_{LB} - (\ln \Lambda)_L + (\ln \Lambda)_B = \ln \Gamma^{-1} - 2C + \frac{3}{2} \ln 2. \quad (10.101)$$

Выражения для кулоновских логарифмов в различных теориях (10.100) - (10.101) отличаются только слагаемым, т.е. все они имеют вид

$$\ln \Lambda = \ln \Gamma^{-1} + a. \quad (10.102)$$

Для экстраполяции выражения (10.102) на область неидеальной плазмы $\Gamma \geq 1$ следует выбирать параметр "a" из сравнения с экспериментальными результатами по коэффициентам переноса неидеальной плазмы или из сравнения с расчетами, выполненными методом молекулярной динамики. Однако в неидеальных газах и плазме проявляется и ряд новых эффектов, которые не учитываются формулой (10.102).

Глава 11

Метод функций Грина в кинетической теории плазмы

11.1 Функции Грина в системе многих тел

Наиболее полным описанием термодинамической системы многих тел является ее анализ с помощью статистического оператора [22], при котором система с некоторой вероятностью может находиться в различных квантовых состояниях. Такое "распределенное" состояние системы называется смешанным. Каждому собственному состоянию $|S\rangle$ приписывается вес ρ_s , так что наблюдаемое значение некоторой величины F' , которой соответствует оператор, определяется по формуле:

$$\langle F \rangle = \sum_S \rho_s \langle S|F|S \rangle,$$

где ρ - статистический оператор, диагональный в S -представлении: $\langle S|\rho|S' \rangle = \delta(S - S')\rho_s$. Наблюдаемое значение может быть записано в виде шпура, следа или свертки операторов:

$$\langle F \rangle = \sum_{SS'} \langle S|\rho|S' \rangle \langle S'|F|S \rangle = Sp\rho F. \quad (11.1)$$

Статистический оператор в некотором базисе называется матрицей плотности и удовлетворяет условию нормировки:

$$\sum_S \rho_s = \sum_S \langle S|\rho|S \rangle = Sp\rho = 1. \quad (11.2)$$

В каноническом ансамбле статистический оператор определяется в соответствии с распределением Гиббса $\rho \sim e^{-\beta H}$ [39], где H' - гамильтониан системы, $\beta = (kT)^{-1}$. В большом каноническом ансамбле $\rho \sim e^{-\beta H}$, где $H = H' - \mu N$, μ - химический потенциал, N - число частиц. Для выполнения условий нормировки выбираем $\rho = \exp(\beta(\Omega - H))$, при этом $\Omega = \Omega(\beta, V, \mu)$ - термодинамический потенциал системы, выражение для которого следует из условия нормировки (11.2):

$$e^{-\beta\Omega} = Sp e^{-\beta H} = \sum_{m,n} e^{-\beta(E_{m,N} - \mu N)}, \quad (11.3)$$

где $E_{m,N}$ - энергия системы N тел в квантовом состоянии. Если состояние системы изменяется из-за взаимодействия со средой, то гамильтониан системы $H(t) = H_0 + V(t)$

зависит от времени. Считая взаимодействие адиабатически включающимся, можно считать $V(-\infty) = 0$. Статистический оператор в отсутствие взаимодействия имеет вид:

$$\rho(-\infty) \equiv \rho = \sum_{S, S'} |S\rangle\langle S| \rho |S'\rangle\langle S'| = \sum_S |S\rangle \rho_s \langle S|.$$

Используя оператор эволюции состояний в представлении Шредингера $T(t, t_0) = \exp(-iH(t - t_0))$, получаем уравнение для матрицы плотности $\rho(t) = \sum_S T(t)|S\rangle \rho_s \langle S| T^\dagger(t) = T(t)\rho T^\dagger(t)$:

$$i \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)]_- \quad (11.4)$$

с начальным условием $\rho(-\infty) = \rho$. В представлении Гейзенберга $\rho_\Gamma(t) = T^\dagger(t)\rho(t)T(t) = \rho$ матрица плотности не зависит от времени, а в представлении Дирака:

$$\rho_D(t) = e^{itH_0} \rho(t) e^{-itH_0} = S(t) \rho_\gamma S^\dagger(t)$$

матрица плотности удовлетворяет уравнению:

$$i \frac{\partial \rho_D}{\partial t} = [V_D(t) \rho_D(t)]_-, \quad \rho_D(-\infty) = \rho. \quad (11.5)$$

Определим N -частичную матрицу плотности [14]:

$$\rho^{(N)}(q_1 \dots q_N, q'_1 \dots q'_N) = \langle \Psi^+(q'_1) \dots \Psi^+(q'_N) \dots \Psi(q_1) \rangle$$

и n -частичные матрицы плотности как свертки по части переменных:

$$\begin{aligned} \rho^{(N)}(q_1 \dots q_N, q'_1 \dots q'_N) &= \langle \Psi^+(q'_1) \dots \Psi^+(q'_n) \Psi(q_n) \dots \Psi(q_1) \rangle = \\ &= \frac{1}{(N-n)!} S_{p(q_{n+1} \dots q_N)} \rho^{(N)}(q_1 \dots q_N, q'_1 \dots q'_N). \end{aligned} \quad (11.6)$$

Матрицы плотности связаны с функциями распределения цепочки ББГКИ соотношением:

$$f^{(n)}(q_1, \dots, q_n) = \rho^{(n)}(q_1, \dots, q_n, q_n, \dots, q_1),$$

т.е. "диагональные" элементы матрицы плотности являются функциями распределения. Аналогично цепочке уравнений Боголюбова можно построить цепочку уравнений для n -частичных матриц плотности. В отличие от классической в квантовой теории нельзя определить функцию распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{V}, t)$, зависящую от координат и импульсов, так как одновременно они неизмеримы. Существуют лишь распределения отдельно по координатам или по импульсам, которые, определяются через операторы рождения и уничтожения:

$$n(\mathbf{r}, t) = \langle \Psi^+(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad n(\mathbf{p}, t) = \langle a_p^\dagger(t) a_p(t) \rangle, \quad (11.7)$$

где операторы Ψ и a связаны преобразованием Фурье, из которого следует:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} e^{-i\mathbf{r} \cdot (\mathbf{p} - \mathbf{p}')} \langle a_p^\dagger(t) a_{p'}(t) \rangle = \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{q}}{(2\pi)^6} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \langle a_p^\dagger(t) a_{p-q}(t) \rangle.$$

Аналогичную формулу можно получить и для $n(\mathbf{p}_1 t)$. Найдем квантовую функцию распределения Вигнера:

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \langle a_p^\dagger(t) a_{p-q}(t) \rangle = \int d\mathbf{r}' e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'} \langle \Psi^+(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t) \rangle, \quad (11.8)$$

из которой интегрированием получаем:

$$n(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t), \quad n(\mathbf{p}, t) = \int d\mathbf{r} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t),$$

т.е. в функции распределения Вигнера содержится информация о распределении частиц в пространстве скоростей и импульсов. Можно показать, что в классическом пределе она совпадает с классической функцией распределения частиц по скоростям и импульсам. Для задач кинетической теории систем с малым отклонением от равновесия, но, возможно, с сильным взаимодействием между частицами удобно построить ряд теории возмущений для матрицы плотности. Из (11.5) следует итерационное уравнение:

$$\rho_D(t) = \rho - i \int_{-\infty}^t \alpha t' [V_D(t') \rho_D(t')]_-.$$

Используем тождество Кубо. Определим оператор A^\otimes соотношением:

$$A^\otimes \cdot B \equiv A^\otimes \cdot B = [AB]_-.$$

Для оператора e^A получаем:

$$e^{A^\otimes} \cdot B = e^A B e^{-A},$$

тогда уравнение для матрицы плотности можно записать в виде:

$$\rho_D(t) = \rho - i \int_{-\infty}^t dt' V_D^\otimes(t') \rho_D(t').$$

Строя итерационный ряд аналогично (11.4), получаем:

$$\rho_D(t) = T \exp \left(- \int_{-\infty}^t dt' V_D^\otimes(t') \right) \cdot \rho = T \left\{ \exp \left(-i \int_{-\infty}^t dt' V_D^\otimes(t') \right) \right\}^\otimes \cdot \rho.$$

Здесь T - хронологический оператор, решение в виде экспоненты является (формальной записью ряда, n -й член которого имеет вид:

$$\frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^t \dots \int_{-\infty}^t dt_1 \dots dt_n T \{ [V_D(t_1) [V_D(t_2) \dots [V_D(t_n) \rho]_- \dots]_- \}.$$

Аналогичный результат получается, если матрицу плотности представить в виде:

$$\rho_D = S(t) \rho S^+(t),$$

выраженном через S -матрицу, разложить S -матрицу в ряд и подставить в матрицу плотности. Среднее значение оператора в представлении Гейзенберга определяется выражением:

$$\langle A_H(t) = Sp \{ \rho \cdot S(t) A_D(t) S(t) \} = Sp \{ \rho_D(t) A_D(t) \}. \quad (11.9)$$

Определим причинные функции Грина:

$$G_c^{(m)}(t_1, \dots, t_m) = \langle T A_H(t_1) B_H(t_2) \dots K_H(t_m) \rangle, \quad (11.10)$$

где операторы заданы в представлении Гейзенберга. Перейдем к представлению взаимодействия (Дирака):

$$A_H(t_1) = S^+(t) A_D(t_1) S(t),$$

$$S \equiv S(\infty), \quad S^+(t) = S^+ \cdot S(\infty, t).$$

Для (функции Грина в представлении Дирака получаем:

$$G_c^{(m)}(t_1, \dots, t_m) = \langle S^+ T \{ S(\infty, t) A_D(t_1) S(t_1, t_2) B_D(t_2) \dots S(t_{m-1}, t_m) K_D(t_m) S(t_m) \} \rangle$$

S -матрица содержит четное число ферми-операторов, перестановки этих операторов не меняют знака, поэтому все S -матрицы можно сгруппировать:

$$G^{(m)}(t_1, \dots, t_m) = \langle S^+ T \{ A_D(t_1) \dots K_D(t_m) S \} \rangle. \quad (11.11)$$

Применим полученные результаты к функции Грина, состоящей из двух операторов:

$$G_c^{(2)}(t_1, t_2) \equiv G_c(x_1, x_2) = i \langle T A(x_1) B(x_2) \rangle. \quad (11.12)$$

Используя определение T -произведения, получим:

$$G_c^{(2)}(x_1, x_2) = i \Theta(t_1 - t_2) \langle A(x_1) B(x_2) \rangle - i \eta \Theta(t_2 - t_1) \langle B(x_2) A(x_1) \rangle.$$

Определим следующие функции Грина:

$$G_{>}(x_1, x_2) = i \langle A(x_1) B(x_2) \rangle, \quad (11.13)$$

$$G_{<}(x_1, x_2) = -i \langle B(x_2) A(x_1) \rangle. \quad (11.14)$$

Причинная функция Грина выражается через них следующим образом:

$$G_c(x_1, x_2) = \Theta(t_1 - t_2) G_{>}(x_1, x_2) + \eta \Theta(t_2 - t_1) G_{<}(x_1, x_2).$$

Введем также перестановочную G_η , запаздывающую G_R и опережающую G_A функции Грина:

$$G_\eta(x_1, x_2) = -i \langle [A(x_1) B(x_2)]_\eta \rangle = G_R(x_1, x_2) + G_A(x_1, x_2), \quad (11.15)$$

$$G_R(x_1, x_2) = -i \Theta(t_1 - t_2) \langle [A(x_1) B(x_2)]_\eta \rangle, \quad (11.16)$$

$$G_A(x_1, x_2) = -i \Theta(t_2 - t_1) \langle [A(x_1) B(x_2)]_\eta \rangle. \quad (11.17)$$

В отсутствие внешнего поля функция Грина инвариантна относительно сдвига по времени, а для пространственно однородной системы имеется трансляционная инвариантность, следовательно, функции Грина являются функциями относительных координат:

$$G(t_1, \mathbf{r}_1, t_2, \mathbf{r}_2) = G(t_1 - t_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Покажем, что функции G и $G_{<}$ связаны соотношением, аналогичным:

$$G_{>}(t) = G_{<}(t + i\beta). \quad (11.18)$$

Из условия однородности следует, что можно выбрать $t_2 = 0$, $t_1 = t$, тогда:

$$\begin{aligned} G_{>}(t) &= -i Sp \left\{ e^{\beta(\Omega-H)} e^{iHt} A e^{-iHt} B \right\} = -i Sp \left\{ e^{\beta\Omega} B e^{iH(t+i\beta)} A e^{-iHt} \right\} = \\ &= -i Sp \left\{ e^{\beta(\Omega-H)} e^{-iH(t+i\beta)} B e^{iH(t+i\beta)} A \right\}, \end{aligned}$$

откуда следует искомое равенство (11.18). Условие (11.18) позволяет выразить любую функцию Грина через одну, например, $G_{<}(t)$:

$$G_c(t) = \Theta(t)G_{<}(t + i\beta) + \eta\Theta(t)G_{<}(t), \quad (11.19)$$

$$G_R(t) = \Theta(t)\{G_{<}(t + i\beta) - \eta G_{<}(t)\}, \quad (11.20)$$

$$G_A(t) = \Theta(-t)\{G_{<}(t + i\beta) - \eta G_{<}(t)\}, \quad (11.21)$$

$$G_\eta(t) = G_{<}(t + i\beta) - \eta G_{<}(t). \quad (11.22)$$

Получим спектральные представления функций Грина в диагональном представлении для гамильтониана и матрицы плотности:

$$\begin{aligned} H|S\rangle &= H_s|S\rangle, \quad \rho|S\rangle = \rho_s|S\rangle \\ G_{<}(t) &= -i \sum_{SS'} \langle S|\rho|S\rangle e^{-iH_s t} \langle S|B|S'\rangle e^{iH'_s t} \langle S'|A|S\rangle. \end{aligned}$$

Это выражение можно формально записать в виде:

$$G_{<}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} I(\omega) e^{-i\omega t}, \quad (11.23)$$

где спектральная плотность $I(\omega) \neq 0$ при $\omega = \omega_{ss'} - H_s - H'_s$.

$$I(\omega) = -2\pi i \sum_{SS'} \rho_s \langle S|B|S'\rangle \langle S'|A|S\rangle \delta(\omega - \omega_{ss'})$$

является преобразованием Фурье функции Грина $I(\omega) = G_{<}(\omega)$. Причинные функции Грина выражаются через Θ -функцию, поэтому найдем преобразование Фурье:

$$\Theta(t) = \int_{-\infty}^t \delta(t') dt'.$$

Используем следующее представление δ -функции Дирака:

$$\delta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega t}.$$

Подставляя в $\Theta(t)$ и переставляя порядок интегрирования, получаем:

$$\Theta(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \int_{-\infty}^t dt' e^{i(\omega - i0)t'} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{e^{i\omega t}}{i(\omega - i0)}.$$

Здесь множитель $-i0$, понимаемый как $\lim(-i\varepsilon)$, $\varepsilon \rightarrow 0$, добавлен для сходимости на нижнем пределе. В результате получаем преобразование Фурье Θ -функции:

$$i\Theta(\pm t) = \pm \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \cdot \frac{e^{i\omega t}}{\omega \pm i0}. \quad (11.24)$$

Вычислим остальные спектральные представления:

$$G_{>}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_{>}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G_{<}(t + i\beta) = e^{\beta\omega} G_{<}(\omega).$$

Для запаздывающей и опережающей функций Грина, используя (11.20) (11.21), получаем:

$$G_R(\omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{G_<(\omega')}{\omega' - \omega - i0} (e^{\beta\omega'} - \eta), \quad (11.25)$$

$$G(\omega) = - \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{G_<(\omega')}{\omega' - \omega + i0} (e^{\beta\omega'} - \eta), \quad (11.26)$$

$$G_\eta(\omega) = G_<(\omega)(e^{\beta\omega} - \eta). \quad (11.27)$$

Для причинной функции Грина, используя выражение:

$$G_c(t) = \Theta(t)G_>(t) + \eta\Theta(-t)G_<(t)$$

и вычисляя преобразование Фурье причинной функции Грина с учетом (11.24) и представлений для $G_>(t)$, $G_<(t)$, находим:

$$G_c(\omega) = \int \frac{d\omega'}{2\pi} G_<(\omega') \left(\frac{e^{\beta\omega}}{\omega' - \omega - i0} - \frac{\eta}{\omega' - \omega + i0} \right). \quad (11.28)$$

Используя формулу Сохоцкого

$$\frac{1}{x \mp i0} = \mathfrak{S} \frac{1}{x} \pm i\pi\delta(x), \quad (11.29)$$

причинную функцию Грина можно представить в виде:

$$G_c(\omega) = \frac{1}{i} V.P. \int \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{G_<(\omega')(e^{\beta\omega} - \eta)}{\omega' - \omega} + \frac{1}{2} G_\eta(\omega) \left(th \frac{\beta\omega}{2} \right)^{-1}, \quad (11.30)$$

где первый член содержит главное значение интеграла. Спектральные представления (11.25)-(11.30) называются формулами Лемана-Челлена. Из формул (11.25), (11.26) следует, что запаздывающая функция $G_R(\omega)$ аналитична в верхней полуплоскости, $G_R(\omega)$ - в нижней. Можно ввести спектральную функцию, выделив из спектральной $I(\omega) = G_<(\omega)$ функцию распределения частиц, т.е. положим $I(\omega) = \Phi_\eta(\omega)f_\eta(\omega)$, где:

$$f_\eta(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - \eta}.$$

Из (11.27) следует, что спектральная плотность $\Phi_\eta(\omega)$ совпадает со спектральной плотностью перестановочной функции:

$$G_\eta(\omega) = \Phi_\eta(\omega).$$

Выражения функций Грина через спектральную плотность $\Phi_\eta(\omega)$ получаются из (11.25)-(11.28) с использованием формулы Сохоцкого:

$$G_c(\omega) = -i\pi\Phi_\eta(\omega) \left(th \frac{\beta\omega}{2} \right)^{-\eta} + f \frac{d\omega'\Phi_\eta(\omega)}{\omega - \omega'}, \quad (11.31)$$

$$G_R(\omega) = -i\pi\Phi_\eta(\omega) + f \frac{d\omega'\Phi_\eta(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (11.32)$$

$$G_A(\omega) = -i\pi\Phi_\eta(\omega) - f \frac{d\omega'\Phi_\eta(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (11.33)$$

$$G_\eta(\omega) = -2\pi i\Phi_\eta(\omega). \quad (11.34)$$

В функциях Грина обычно $B = A^+$, в этом случае спектральная плотность:

$$I(\omega) = \sum_{SS'} \rho_s |A_{ss'}|^2 \delta(\omega - \omega_{ss'}) \geq 0,$$

следовательно, $\Phi_\eta(\omega) \geq 0$, поэтому в уравнениях (11.31) - (11.34) можно разделить действительную и мнимую части:

$$ReG_c(\omega) = -\frac{1}{\pi} f \frac{d\omega' ImG_c(\omega')}{\omega - \omega'} \left(th \frac{\beta\omega'}{2} \right)^\eta, \quad (11.35)$$

$$ImG_c(\omega) = -\pi\Phi_\eta(\omega) \left(th \frac{\beta\omega}{2} \right)^{-\eta}, \quad (11.36)$$

$$ReG_R(\omega) = -\frac{1}{\pi} f \frac{d\omega' ImG_R(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (11.37)$$

$$ImG_R(\omega) = -\pi\Phi_\eta(\omega), \quad (11.38)$$

$$ReG_A(\omega) = \frac{1}{\pi} f \frac{d\omega' ImG_A(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (11.39)$$

$$ImG_A(\omega) = -\pi G_\eta(\omega). \quad (11.40)$$

Соотношения (11.35) - (11.40), позволяющие выразить функцию Грина через мнимую часть одной из функций Грина и связать вещественные и мнимые части функций Грина, называются дисперсионными соотношениями. В качестве примера использования полученных выражений вычислим функцию Грина в системе взаимодействующих частиц. Основой вычисления является формула (11.34), связывающая спектральную плотность $\Phi_\eta(\omega)$ с перестановочной функцией Грина. В отсутствие взаимодействия представления Гейзенберга и Дирака совпадают, функция Грина свободной частицы определяется хронологическим произведением операторов рождения и уничтожения:

$$G(x_1, x_2) = -i \langle T \Psi(x_1) \Psi^+(x_2) \rangle, \quad (11.41)$$

где операторы рождения и уничтожения определяются в координатном представлении:

$$\Psi(x) = e^{iH_0 t} \Psi(r) e^{-iH_0 t},$$

$$H_0 = \int d\mathbf{r}' \Psi^+(\mathbf{r}') h(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}'), \quad h(\mathbf{r}) = -\frac{\nabla^2}{2} - \mu.$$

Переход к импульсному представлению осуществляется по формулам:

$$a_p(t) = \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi)^3} \Psi(x) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \quad a_p^+(t) = \int \frac{d\mathbf{r}}{(2\pi)^3} \Psi^+(x) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}.$$

Из уравнения движения оператора в представлении Гейзенберга следует:

$$a_p(t) = a_p e^{-i\varepsilon_p t}, \quad a_p^+(t) = a_p^+ e^{i\varepsilon_p t}. \quad (11.42)$$

В представлении Гейзенберга:

$$a_p(t) = e^{iH_0 t} a_p e^{-iH_0 t}, \quad H_0 = \sum_p \varepsilon_p a_p + a_p.$$

Дифференцируя по времени, получаем цепочку равенств:

$$\begin{aligned} -\frac{2a_p(t)}{dt} &= i e^{iH_0 t} (H_0 a_p - a_p H_0) e^{-iH_0 t} = e^{iH_0 t} [H_0 a_p] e^{-iH_0 t}, \\ [H_0, a_p] &= \sum_{p'} (a_{p'}^+ a_p a_p - a_p a_{p'}^+ a_{p'}) \varepsilon_{p'} = \\ &= - \sum_{p'} \varepsilon_{p'} (a_{p'}^+ a_p + a_p a_{p'}^+) a_{p'} = - \sum_{p'} \varepsilon_{p'} \delta_{pp'} a_{p'} = -\varepsilon_p a_p. \end{aligned}$$

Решая полученное дифференциальное уравнение, находим искомое соотношение. Вычислим коммутатор операторов рождения и уничтожения:

$$[\Psi(x)\Psi^+(x)]_\eta = \int \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} e^{i\varepsilon_p t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} [a_p a_{p'}^+]_\eta.$$

Из перестановочных соотношений получается:

$$[\Psi(x)\Psi^+(x)]_\eta = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} e^{-ipx} \delta(\omega - \varepsilon_p).$$

откуда следует $\Phi(p) = \delta(\omega - \varepsilon_p)$, соответственно,

$$I(p) = \delta(\omega - \varepsilon_p) f_\eta(\omega) = n_p \delta(\omega - \varepsilon_p),$$

где функция распределения частиц имеет вид:

$$n_p = \langle a_p^+ a_p \rangle = (e^{\beta\varepsilon_p} - \eta)^{-1}.$$

В результате, подставляя $\Phi(p) = \delta(\omega - \varepsilon_p)$ в (11.25) - (11.28), получаем выражения для функции Грина свободной частицы:

$$G_c^{(0)}(p, \omega) = \frac{1 + \eta n(p)}{\omega - \varepsilon_p + i0} - \frac{\eta n(p)}{\omega - \varepsilon_p - i0}, \quad (11.43)$$

$$G_{>}^{(0)}(p, \omega) = \frac{1 + \eta n(p)}{\omega - \varepsilon_p + i0}, \quad (11.44)$$

$$G_{<}^{(0)}(p, \omega) = -2\pi i \delta(\omega - \varepsilon_p) n(\omega), \quad (11.45)$$

$$G_\eta^{(0)}(p, \omega) = -2\pi i \delta(\omega - \varepsilon_p), \quad (11.46)$$

$$G_R^{(0)}(p, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_p + i0}, \quad (11.47)$$

$$G_n^{(0)}(p, \omega) = -\frac{1}{\omega - \varepsilon_p - i0}. \quad (11.48)$$

В термодинамической теории возмущений введем функцию Грина в температурном представлении взаимодействия:

$$G(z_1, z_2) = - \langle T \Psi_H(z_1) \Psi_H^+(z_2) \rangle. \quad (11.49)$$

где $z = (u, \mathbf{r})$ - четырехмерная координата (u - температурная, \mathbf{r} - пространственная координаты), T - оператор упорядочивания. Нулевые операторы здесь - в представлении Гейзенберга. Переход к дираковскому температурному представлению взаимодействия осуществляется с помощью S -матрицы:

$$\Psi_H(z) = S^{-1}(u)\Psi(z)S(u),$$

где $\Psi(z)$ - оператор в представлении Дирака. Подставляя в (11.49) и учитывая порядок координат u , получим:

$$G(z_1, z_2) = - \langle S^{-1}(\beta)T(\Psi(z_1)\Psi^+(z_2))S(\beta) \rangle .$$

Среднее значение определяется усреднением по статистическому оператору $\rho = \exp[\beta(\Omega - H)]$:

$$G(z_1, z_2) = -e^{\beta\Omega}Sp \left[e^{-\beta H} S^{-1}(\beta)T(\Psi(z_1)\Psi^+(z_2))S(\beta) \right] .$$

Учитывая, что $S^{-1}(u) = \exp(uH_0) \exp(-uH_0)$, функция Грина преобразуется к виду:

$$G(1, 2) = - \frac{T\Psi(1)\Psi^+(2)S(\beta) \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0}, \quad (11.50)$$

где индекс "0" означает усреднение по состоянию системы без взаимодействия. Числитель и знаменатель в (11.50) разлагаются с использованием теоремы Вика (§7) в ряд по потенциалу взаимодействия:

$$G(1, 2) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{G(1, 2)}{2^n n!} \Big/ \sum_{n=0}^{\infty} S_n.$$

Первые члены разложения числителя имеют вид:

$$G_0(1, 2) = G_0(1, 2),$$

$$\begin{aligned} G_0(1, 2) = & - \int d\tilde{1}d\tilde{2}V(\tilde{1}\tilde{2}) \left\{ G_0(1, 2) \left(G_0(\tilde{1}, \tilde{1}^+)G_0(\tilde{2}, 2^+) + \eta G_0(1, 2^+)G_0(2, 1^+) \right) + \right. \\ & + \eta(G_0(1, \tilde{1})G_0(\tilde{1}, 2)(G_0(\tilde{2}, \tilde{2}^+) + \eta(G_0(1, \tilde{2})(G_0(\tilde{2}, 2)(G_0(\tilde{1}, \tilde{1}^+) + \\ & \left. + G_0(1, \tilde{1})G_0(2, \tilde{2})(G_0(\tilde{1}, \tilde{2} + G_0(1, \tilde{2})G_0(\tilde{1}, 2)(G_0(\tilde{2}, \tilde{1})) \right\} . \end{aligned}$$

Графическое изображение членов ряда приведено на рис. 10.1. Аналогичное представление имеют и следующие члены ряда. Знаменатель в (11.50) содержит разложение по потенциалам взаимодействия. Перегруппировав члены в числителе, выделяя несвязные диаграммы, получим ряд, в точности сокращающийся со знаменателем. В результате достигается существенное упрощение - отбрасываются несвязные графики и знаменатель. Далее учтем, что ряд связанных диаграмм содержит топологически эквивалентные, количество которых определяется числом перестановок концов пунктиров (изображающих потенциалы взаимодействия) - 2^n и числом перестановок пунктиров - $n!$. В результате получаем разложение, содержащее связанные, топологически не эквивалентные диаграммы:

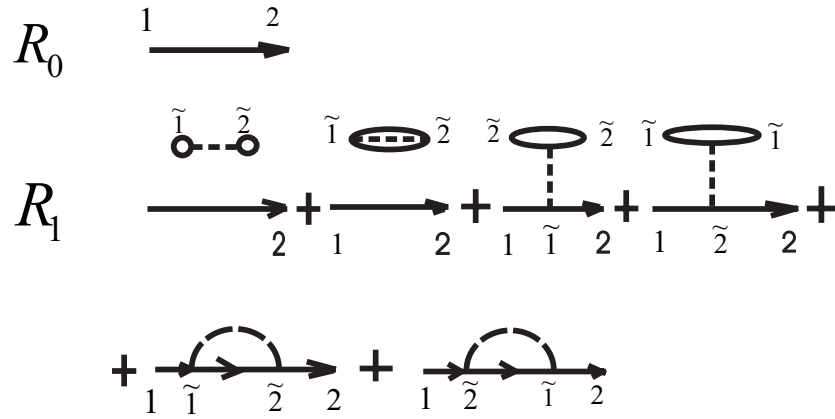


Рис. 11.1: Разложение числителя функции Грина в ряд по потенциалу взаимодействия

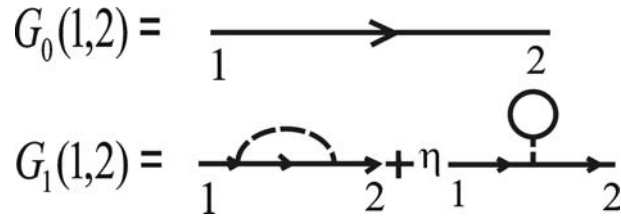


Рис. 11.2: Функции Грина в первых приближениях.

Диаграммные правила вычисления функции Грина в системе взаимодействующих частиц аналогичны сформулированным в термодинамике. Входящей 1-й и выходящей 2-й линиям соответствует сорт вычисляемой функции Грина. Каждой замкнутой линии соответствует отдельный сорт частиц, по которым необходимо просуммировать, включая сумму по спинам частиц. Как и при вычислении термодинамического потенциала, замкнутые сами на себя функции Грина, аналогичные второму члену $G - 1(1, 2)$, дают $n_a Z_a$. Суммирование по сортам частиц дает $\sum n_a Z_a = 0$ в силу условия электронейтральности, поэтому диаграммы, содержащие такие фрагменты, следует исключать. В общем случае функция Грина $G(1, 2)$ начинается функцией Грина свободной частицы $G_0(1, 1')$ и заканчивается $G_0(2', 2)$, поэтому она может быть представлена в виде:

$$G = G_0 + G_0 \sum G_0$$

Рис. 11.3: Представление функции Грина в ряд через массовый оператор.

$$G_0(1, 2) = G_0(1, 2) + \int d_1' d_2' G_0(1, 1') \Sigma(1', 2') G_0(2', 2). \quad (11.51)$$

Здесь возникает блок $\Sigma(1', 2')$, имеющий два входа и называемый собственноэнергетической частью. В свою очередь, в ней можно выделить неприводимую часть. Если

диаграмма делится на две части при разрезании одной гриновской функции, она называется приводимой. Для приводимой собственно энергетической части n -го порядка, очевидно, выполняется соотношение $\Sigma_n = M_k \cdot G_0 \cdot \Sigma_{n-k}$, где индекс указывает порядок диаграммы. В общем случае:

$$\Sigma = \sum_{k=1}^n M_k \cdot G_0 \cdot \Sigma_{n-k} = M_n + \sum_{k=1}^{n-1} M_k \cdot G_0 \cdot \Sigma_{n-k},$$

так как в Σ_n неприводимая часть M_n выделяется единственным образом. Полная собственно-энергетическая часть может быть представлена в виде:

$$\Sigma = \sum_{n=1}^{\infty} \Sigma_n = M + M \cdot G_0 \cdot \Sigma,$$

где M является массовым оператором частицы. Подставляя в (11.51), получим уравнение Дайсона:

$$G_0 = G_0 + G_0(M + MG_0\Sigma)G_0,$$

$$G = G_0 + G_0MG,$$

которое можно представить графически: где двойная линия обозначает функцию



Рис. 11.4: Уравнение Дайсона

Грина в среде, одинарная - свободную. В импульсном представлении что уравнение становится алгебраическим:

$$G(p) = G_0(p) + G_0(p)M(p)G(p),$$

решение которого имеет вид:

$$G(p) = \frac{1}{[G_0(p)]^{-1} - M(p)} = \frac{1}{i\omega_n - [\varepsilon_p + M(p)]}. \quad (11.52)$$

Здесь использовано выражение для функции Грина свободной частицы. Из (11.52) следует, что массовый оператор определяет поправку к энергии частицы, обусловленную взаимодействием. Массовый оператор в общем случае является комплексной величиной, поэтому функция Грина частицы $\sim \exp(i(\varepsilon_p + M_p)t)$ будет затухать, если M содержит мнимую часть, что соответствует существованию возбуждений, с конечным временем жизни и называемых квазичастицами. В функциях Грина содержится информация о системе не менее полная, чем в одночастичной функции распределения, поэтому необходимо найти уравнение, которому она удовлетворяет [1]. Определим n -частичную функцию Грина:

$$G^{a_1 \dots a_n}(1 \dots n, n' \dots 1') = (-1)^n \langle T \Psi_{a_1}(1) \dots \Psi_{a_n}(n) \Psi_{a_n}^+(n') \dots \Psi_{a_1}^+(1') \rangle.$$

Полевые операторы удовлетворяют уравнению

$$\frac{\partial \Psi(z)}{\partial u} = [H(n), \Psi(z)]_-,$$

где $H(u)$ - гамильтониан системы. Вычисляя коммутатор, получаем :

$$\frac{\partial \Psi_a(z)}{\partial u} = - \left(h_a(\mathbf{r}) + \sum_b \int dz' V^{ab}(zz') \Psi_b(z') \Psi_b(z') \right) \Psi_a(z),$$

где $h_a = -\nabla^2/2m_a - \mu_a$, $V^{ab}(zz') = \delta(u-u')V^{ab}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$. Аналогичное уравнение можно написать и для оператора. Продифференцируем одночастичную функцию Грина:

$$G^a(11') = - \langle T \Psi_a(1) \Psi_a^+(1') \rangle = -\Theta(u_1-u_1') \langle \Psi_a(1) \Psi_a^+(1') \rangle + \eta \Theta(u_1'-u_1) \langle \Psi_a^+(1') \Psi(1) \rangle.$$

Дифференцирование по u_1 правой части с учетом $\Theta'(u) = \delta(u)$ приводит к $\delta(u_1-u_1')$, что позволяет использовать перестановочные соотношения $[\Psi(1)\Psi^+(1)]_\eta = \delta(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_1')$.

В результате имеем уравнение:

$$\frac{\partial G^a(11')}{\partial u_1} = -\delta(1-1') - h_a(\mathbf{r}_1)G(11') + \sum_b \int d2 V^{ab}(12) \langle T \Psi_b^+(2) \Psi_b(2) \Psi_a^+(1) \rangle.$$

Последний член можно записать через двухчастичную функцию Грина, получая окончательно уравнение для функции Грина:

$$- \left(\frac{\partial}{\partial u_1} + h_a(\mathbf{r}_1) \right) G^a(1, 1') = \delta(1-1') - \sum_b \eta_b \int d2 V^{ab}(12) G^{ab}(12, 2^+ 1'), \quad (11.53)$$

где 2^+ означает предел $u_2 + 0$. Наличие в правой части δ -функции дает возможность отождествить причинную функцию Грина с функцией Грина в математическом смысле. Уравнение (11.53) аналогично по смыслу первому уравнению классической цепочки Боголюбова, оно связывает одночастичную функцию Грина с двухчастичной. Уравнения для функций Грина более высоких порядков получаются аналогично и имеют вид [14]:

$$\begin{aligned} - \left(\frac{\partial}{\partial u_1} + h_a(\mathbf{r}_1) \right) G^{a_1 \dots a_n} &= \sum_{j'=1'}^{n'} (\eta_{a'})^{j'-1} \delta_{a_1 a_j} \delta(1-j') G^{a_2 \dots a_n} (2 \dots n, n' \dots j'+1, j-1 \dots 1') - \\ &- \sum_{a_{n+1}} \eta_{n+1} \int d(n+1) V^{a, a_{n+1}}(1, n+1) G^{a_1 \dots a_{n+1}}(1 \dots n+1, (n+1)^+ \dots 1'). \end{aligned} \quad (11.54)$$

В каждом уравнении цепочки содержатся функции Грина трех соседних порядков. Для решения этой системы уравнений необходимо применять методы расщепления, аналогичные классической теории.

11.2 Метод ВКФ в кинетической теории плазмы

Одной из важных задач кинетической теории плазмы является вычисление диссипативных характеристик - электро- и теплопроводности, вязкости и других кинетических коэффициентов. В последние десятилетия была установлена важная связь диссипативных и флуктуационных характеристик среды, получившая название флуктуационно-диссипативной теоремы [46], которая является обобщением теоремы Найквиста. Флуктуации в системе описываются временными корреляционными функциями, а диссипация характеризуется электропроводностью плазмы, т.е. электронами как

частицами, имеющими наибольшую подвижность. Вычисление кинетических коэффициентов плазмы с помощью флуктуационно - диссипативной теоремы сводится к нахождению временных корреляционных функций (ВКФ). Формулы, устанавливающие такую связь, были получены Кубо, Гринвудом, Пайерлсом, Латтинджером и др. в различных частных случаях. Приведем формулу, полученную Кубо [120] для электропроводности плазмы. Равновесный статистический оператор имеет вид: $\rho_0 = \exp[\beta(\Omega - H)]$, где $H = Y_0 + V - \mu N$, с условием нормировки $S_p \rho_0 = 1$. Наложим на систему внешнее возмущение ΔH , тогда статистический оператор станет неравновесным $\rho = \rho_0 + \Delta\rho$, где $\Delta\rho$ - добавка, обусловленная внешним воздействием ΔH . Уравнение для статистического оператора:

$$\frac{i\partial\rho}{\partial t} = [H + \Delta H, \rho].$$

Будем считать взаимодействие между частицами в системе произвольным, а внешнее возмущение - малым, так что членами второго порядка $\Delta\rho \cdot \Delta H$ можно пренебречь. В линейном приближении, учитывая $\rho_0 = const$, получаем:

$$\frac{i\partial\Delta\rho}{\partial t} = [H, \Delta\rho] + [\Delta H, \rho_0] = H^\otimes \Delta\rho + [\Delta H, \rho_0]. \quad (11.55)$$

Здесь использован оператор Кубо A^\otimes . Общее решение неоднородного уравнения (11.55) будем искать в виде :

$$\Delta\rho = \left(e^{-itH}\right)^\otimes A(t) = e^{-itH} A(t) e^{itH}.$$

Подставляя в (11.55), имеем уравнение для оператора $A(t)$:

$$\dot{A} = -i \left(e^{itH}\right)^\otimes [\Delta H, \rho_0] = -ie^{itH} [\Delta H(t), \rho_0] e^{-itH}.$$

Интегрируя его и считая, что внешнее воздействие было адиабатически выключено при $t = -\infty$, получим:

$$\Delta\rho(t) = -i \int_{-\infty}^t e^{i(t'-t)H} [\Delta H(t'), \rho_0] e^{-i(t'-t)H} dt'.$$

Заменяя переменные, находим:

$$\Delta\rho(t) = -i \int_0^\infty d\tau e^{i\tau H} [\Delta H(t - \tau), \rho_0] e^{-i\tau H}. \quad (11.56)$$

В этом выражении коммутатор $[B(t), \rho_0]$ можно вычислить, используя тождество Кубо:

$$[B(t), \rho_0] = e^{-itH} B e^{itH} e^{-\beta H} - e^{-\beta H} e^{-itH} B e^{itH} = -i\rho_0 \int d\lambda B(t - i\lambda).$$

Рассмотрим случай, когда внешним возмущением является однородное электрическое поле $E \exp(i\omega t)$. При этом $\Delta H(t) = -d_\nu(t) E_\nu \exp(i\omega t)$, где $d_\nu = ex_\nu - \nu$ - я компонента оператора дипольного момента системы. Одночастичный оператор координаты в представлении вторичного квантования имеет вид:

$$\underline{x} = \sum x^{(i)} = \sum_{a,b} \langle a | \underline{x} | b \rangle \eta_a^+ \eta_b.$$

Используя тождество Кубо и выражение для $\Delta H(t)$, получаем:

$$\Delta\rho(t) = \rho_0 \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \int_0^\beta d\lambda e^{i\tau H} j_\nu(\tau - i\lambda) e^{-i\tau H} E_\nu(t) \equiv \rho_0 \delta\rho.$$

Вычислим отклик системы на внешнее электрическое поле, т.е. ток, возникающий в системе:

$$\langle j_\mu \rangle = Sp(\Delta\rho j_\mu) = Sp(\rho_0 \delta\rho j_\mu) = \langle \delta\rho j_\mu \rangle.$$

Отсюда следует закон Ома $\langle j_\mu \rangle = \sigma_{\mu\nu} E_\nu$, где электропроводность плазмы определяется формулой Кубо:

$$\sigma_{\mu\nu} = \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \int_0^\beta d\lambda \langle j_\nu(\tau - i\lambda) j_\mu(0) \rangle, \quad (11.57)$$

где оператор тока $J_\nu = e p_\nu / m$ выражается через оператор импульса. В представлении вторичного квантования получаем:

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{p}^{(i)} = \sum_{p',k} \langle p' - \frac{k}{2} | \mathbf{p} | p' + \frac{k}{2} \rangle a_{p'-k/2}^+ a_{p'+k/2}.$$

В результате находим:

$$p_\nu(\tau - i\lambda) = \sum_{p,k} p'_\nu a_{p'-k/2}^+(\tau - i\lambda) a_{p'+k/2}(\tau - i\lambda),$$

$$p_\mu(0) = \sum_{p',k} p'_\mu a_{p'+k/2}^+ a_{p-k/2}.$$

Подставляя в (11.57), вычисляем электропроводность среды:

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{e^2}{m^2} \int \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} p'_\nu p_\mu \int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau} \int_0^\beta d\lambda \cdot$$

$$\cdot \langle a_{p'-k/2}^+(\tau - i\lambda) a_{p'+k/2}(\tau - i\lambda) a_{p'+k/2}^+ a_{p-k/2} \rangle. \quad (11.58)$$

Определим функцию Грина и ее преобразование Фурье:

$$\tilde{G}_{pp'}(k, \tau) = \int_0^\beta d\lambda \langle a_{p'-k/2}^+(\tau - i\lambda) a_{p'+k/2}(\tau - i\lambda) a_{p'+k/2}^+ a_{p-k/2} \rangle,$$

$$G_{pp'}(k, \omega) = \int_0^\infty d\tau e^{i\omega\tau} \tilde{G}_{pp'}(k, \tau). \quad (11.59)$$

Окончательно выражение электропроводности через функцию Грина имеет вид:

$$\sigma_{\mu\nu}(k, \omega) = \frac{e^2}{m^2} \int p_\mu n p'_\nu G_{pp'}(k, \omega) \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6}. \quad (11.60)$$

Другое ее представление можно получить, проинтегрировав (11.57) по частям:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \sigma_{\mu\nu}^{(1)}(\omega) + \sigma_{\mu\nu}^{(2)}(\omega), \quad \sigma_{\mu\nu}^{(1)}(\omega) = \frac{1}{-i\omega} e^{-i\omega\tau} \int_0^\beta d\lambda \langle j_\mu(\tau - i\lambda) j_\nu(0) \rangle \Big|_0^\infty -$$

$$- \frac{1}{-i\omega} \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \int_0^\beta d\lambda \langle \dot{j}(\tau - i\lambda) j_\nu(0) \rangle,$$

$$\sigma_{\mu\nu}^{(2)}(\omega) = \frac{1}{-i\omega} \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \int_0^\beta d\lambda \langle \dot{j}(\tau - i\lambda) j_\nu(0) \rangle. \quad (11.61)$$

Первый член преобразуется с помощью тождества Кубо:

$$\sigma_{\mu\nu}^{(1)}(\omega) = \frac{1}{i\omega} \int_0^\beta d\lambda \langle \sum_k \dot{x}_\mu^{(k)} e^{(k)} j_\nu(0) \rangle = \sum_k \frac{e_k}{\omega} \langle [x_\mu^{(k)}(0) j_\nu(0)]_- \rangle.$$

Выражая плотность тока через импульсы и используя соотношение неопределенностей, получаем:

$$\sigma_{\mu\nu}^{(1)}(\omega) = -i \frac{ne^2}{m\omega} \delta_{\mu\nu}. \quad (11.62)$$

Эта часть электропроводности представляет недиссипативную часть (формула Друде-Лоренца). Преобразуем второй член в выражении электропроводности (11.61), используя тождество Кубо:

$$\int_0^\beta \langle j(\tau - i\lambda) j_\nu(0) \rangle d\lambda = i \text{Sp}[j(\tau), \rho_0] J_\nu(0) = i \langle [j_\mu(\tau), J_\nu(0)] \rangle.$$

В результате

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{ne^2}{im\omega} \delta_{\mu\nu} - i \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} \langle [j_\mu^{(\tau)}, J_\nu(0)]_- \rangle. \quad (11.63)$$

Введем запаздывающую функцию Грина :

$$K_{\mu\nu}^R(\tau) = i\Theta(\tau) \langle [j_\mu(\tau), J_\nu(0)]_- \rangle, \quad (11.64)$$

тогда электропроводность плазмы можно выразить в следующем виде:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{ine^2}{m\omega} \delta_{\mu\nu} + i \frac{1}{i\omega} \int_0^\infty d\tau e^{-i\omega\tau} K_{\mu\nu}^R(\tau). \quad (11.65)$$

Для вычисления электропроводности плазмы можно развить два подхода. В первом [63]- используются функции Грина во внешнем поле. Применение функционального дифференцирования приводит к формуле типа (11.65) и выражает электропроводность плазмы через вершинную часть. Во втором подходе диаграммная техника развивается на основе (11.64). Запаздывающая функция Грина (11.64) содержит усреднение по равновесной матрице плотности $\rho_0 \sim \exp(-\beta H)$, а операторы зависят от реального времени, т.е. возникает зависимость от времени типа $a(t - iu)$ с комплексным временем. Диаграммной техники, оперирующей с комплексным временем, не существует, поэтому метод расчета основан на использовании температурной диаграммной техники и аналитического продолжения с мнимой на вещественную ось времени. Введем спектральную плотность коррелятора токов:

$$J_{\mu\nu}(\omega) = 2\pi \sum_{m,n} \rho_n \langle n | j_\mu(0) | m \rangle \langle m | j_\nu(0) | n \rangle \delta(\omega - \omega_{mn}),$$

где $\rho_n = \exp \beta(\Omega - E_n + \sum \mu_s N_s)$.

Повторяя вывод спектрального представления для запаздывающей функции $K_{pp'}^R$, заменяя коммутатор:

$$\langle [\Psi(1)\Psi^+(1')]_+ \rangle \longrightarrow \langle [j_\nu(0)j_\mu(\tau)]_- \rangle$$

получаем

$$K_{pp'}^R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega' - \omega} (1 - e^{-\beta\omega'}) J_{\mu-\nu}(\omega'). \quad (11.66)$$

Температурная функция Грина:

$$K_{pp'}(u) = \langle T(j_\mu(u)j_\nu(0)) \rangle \quad (11.67)$$

где $|u| \leq \beta$, имеет свойство периодичности $K_{pp'}(u) = K_{pp'}(u + \beta)$, что позволяет разложить ее в ряд Фурье:

$$K_{pp'}(u) = \frac{1}{\beta} \sum_e e^{-u\omega_e} K_{pp'}(\omega_e), \quad K_{pp'}(\omega_e) = \int_0^\beta du e^{u\omega_e} K_{pp'}(u),$$

где $\omega_e = 2i\pi e/\beta$. Введем спектральное представление для $K_{pp'}(u)$ при $u > 0$:

$$K_{pp'}(u) = \langle j_\mu(u)j_\nu(0) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' J_{\mu\nu}(\omega') e^{-u\omega'},$$

$$K_{pp'}(\omega_e) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{\omega' - \omega_e} (1 - e^{-\beta\omega'}) J_{\mu\nu}(\omega'). \quad (11.68)$$

Сравнивая с (11.66), находим основное свойство $K_{pp'}^R(\omega) = K_{pp'}(\omega_e)$. Для истинной функции Грина (11.67) диаграммная техника существует, поэтому полученное соотношение позволяет сначала с использованием диаграммной техники найти $K_{pp'}(\omega_e)$, затем $K_{pp'}^R(\omega)$ и, подставляя в (11.65), - электропроводность плазмы. Сформулируем температурную диаграммную технику для функции Грина (11.67). Обобщение на многосортную систему имеет вид:

$$K_{\mu\nu}(k, u) = \sum_{SS'} \frac{e_s e_{s'}}{m_s m_{s'}} \sum_{pp'} p_\mu p_\nu \cdot \frac{\langle T(a_{s,p+k/2}^+(u) a_{s,p-k/2}(S, u) a_{s,p-k/2}^+(S) a_{s,p+k/2}(S)) \rangle_0}{\langle S(\beta) \rangle_0}, \quad (11.69)$$

$$S(\beta) = T \exp \left(- \int_0^\beta du V(u) \right).$$

Здесь операторы рождения и уничтожения взяты в температурном представлении взаимодействия. Использование теоремы Вика и спаривание операторов приводит к ряду по потенциалу взаимодействия, содержащему несвязные диаграммы. Аналогично ряду для функции Грина несвязные диаграммы и знаменатель в (11.69) сокращаются. Рассмотрим нулевой порядок в (11.69). Связная диаграмма в этом случае одна. По теореме Вика:

$$\begin{aligned} \langle T(a_{s,p}^+(u) a_{s,p}(u) a_{s',p'}^+ a_{s',p'}) \rangle_0 &= \langle T(a_{s,p}^+(u) a_{s',p'}) \rangle \langle (a_{s',p}^+ a_{s,p}(u)) \rangle_0 = \\ &= -G_{s,p}^{(0)} \delta_{pp'} \delta_{s's'} \cdot G_{s',p}^{(0)} \delta_{pp'} \delta_{s's'}. \end{aligned}$$

Вычисляя преобразование Фурье, получаем:

$$\begin{aligned} K^{(0)}(i\omega_e) &\sim \int_0^\beta e^{-i\omega u} \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{i\omega_n u}}{i\omega_n - \varepsilon_p} \cdot \frac{1}{\beta} \sum_r \frac{e^{-i\omega_r u}}{i\omega_r - \varepsilon_p} = \\ &= \sum_{k,r} \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{i\omega_u - \varepsilon_p} \cdot \frac{1}{i\omega_r - \varepsilon_p} \int_0^\beta e^{iu(\omega_u - \omega_r - \omega_e)} du. \end{aligned}$$

Последний интеграл дает сохранение энергии $\delta(\omega_u - \omega_r - \omega_e)$:

$$K^{(0)}(i\omega_e) \sim \frac{1}{\beta} \frac{1}{\omega_k - \varepsilon_p} \cdot \frac{1}{\omega_k - \omega_e - \varepsilon_p}.$$

Это свойство сохранения алгебраической суммы частот сохраняется во всех порядках. В нулевом порядке имеем:

$$K^{(0)}(i\omega_e) = - \sum_s \frac{e_s^2}{m_s^2} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} p_\mu p_\nu \frac{1}{\beta} \sum_q \frac{1}{\omega_q - \varepsilon_p^o} \cdot \frac{1}{\omega_q - \omega_e - \varepsilon_p^o}.$$

В первом порядке теории возмущений отдельные члены изображаются диаграммами, приведенными на рис. 10.4. Диаграммы "а" и "б" обращаются в нуль вследствие электронейтральности. Диаграммы "г" и "д" эффективно учитываются заменой функции Грина свободной частицы на функцию Грина частицы в среде после вычисления массового оператора. Остается вклад диаграммы "в", который вычисляется аналогично нулевому порядку теории возмущений:

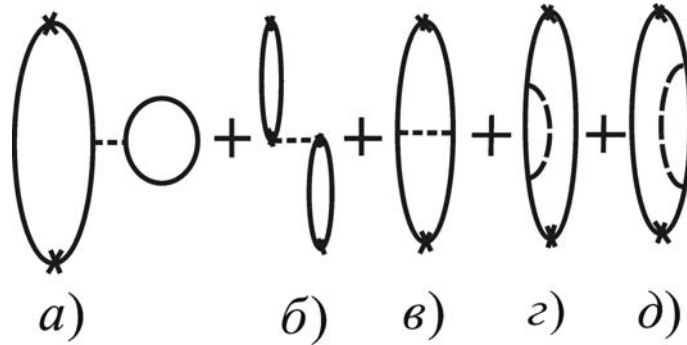


Рис. 11.5: Диаграммы первого порядка теории возмущений в функции Грина $K_{\mu\nu}(u)$

$$K_{\mu\nu}^{(1)}(\omega_e) = - \sum_s \frac{e_s^2}{m_s} \int \frac{d\mathbf{p}d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6 \beta^2} \sum_{\omega_m} \sum_{\omega_j} \frac{1}{\omega_j - \omega_m - \varepsilon_p'} \cdot \frac{1}{\omega_j - \omega_m - \varepsilon_p} \cdot \frac{1}{\omega_j - \omega_e - \varepsilon_p} \cdot p_\mu p'_\nu.$$

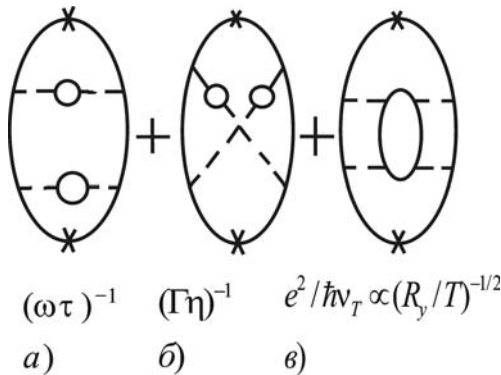


Рис. 11.6: Диаграммы второго порядка в функции Грина $K_{\mu\nu}(u)$

Во втором порядке теории возмущений опустим диаграммы, которые можно не учитывать вследствие условия электронейтральности, перенормировки функции Грина и потенциала. Остаются диаграммы, изображенные на рис. 11.6, под которыми приведено их отношение к диаграмме $K_{\mu\nu}^{(1)}(\omega_e)$.

Для записи выражений, соответствующих диаграммам, можно сформулировать следующие диаграммные правила:

1. диаграмма n -го порядка является замкнутой и содержит n потенциалов (кулоновских или экранированных),

2. в местах входа приписать импульс \underline{p} и частоту ω_e , выхода - \underline{p}' , ω_e , во всех узлах сохраняются импульс и частота,
3. каждой петле поставить в соответствие сорт частицы и знак "
4. функции Грина поставить в соответствие $\longrightarrow p, \omega_n \sim G = (\omega_n - 1/\varepsilon_p)$,
5. потенциалу - $\longrightarrow q, \alpha_m \sim -\tilde{\Phi}_q(\alpha_m)$,
6. по каждой внутренней частоте провести суммирование $\beta^{-1} \sum \omega_n$ по внутреннему импульсу - интегрирование $\int d\mathbf{q}/(2\pi)^3$,
7. полученное выражение проинтегрировать и просуммировать:

$$\sum_{S, S'} \frac{e_s e_{s'}}{m_s m_{s'}} \int \frac{d\mathbf{p} d\mathbf{p}'}{(2\pi)^6} \dots p_\mu p'_\nu.$$

Суммирование по частотам производится методом функций комплексного переменного. Параметры, указанные на рис. 11.6, следуют из того, что для графика "а" по сравнению с "в" на рис. 11.6 добавлены две функции Грина, квадрат потенциала и концентрация:

$$\int d\mathbf{q} \frac{1}{\beta} \sum_{\omega q} G(p + q + \omega_n) (G(p + q)) V_q^2 n \sim \frac{1}{\omega_n \tau}, \quad \tau \sim (\beta e^2) n_i V_\tau,$$

график "в" учитывает второе борновское приближение, поэтому он пропорционален параметру квантово-механической теории возмущений, график "б" является обменным. Далее в каждом из графиков вместо свободных функций Грина можно учесть функцию Грина с учетом влияния среды, что особенно важно в низкочастотном пределе, так как в высокочастотном поле движение частицы за характерное время изменения поля можно считать свободным, а в статическом пределе необходимо учитывать влияние столкновений на функцию Грина.

11.3 Электропроводность плазмы

Рассмотрим случай, когда параметр квантовомеханической теории возмущений мал: $e^2/\hbar v_T \ll 1$ или $Ry/kT < 1$. Из предыдущего рассмотрения следует, что для получения статической проводимости высокотемпературной плазмы следует учесть графики типа "а" (см. рис. 11.6). Кроме того, в соответствии со сказанным о применении метода ВКФ к плазме, перенормируем взаимодействие в ряду теории возмущений для функций Грина:

$$\tilde{v}_{ab}(\mathbf{q}, \omega_q) = v_{ab}(\mathbf{q}) + \sum_c v_{ac}(\mathbf{q}) \pi_c(\mathbf{q}, \omega_q) \tilde{v}_{cb}(\mathbf{q}, \omega_q) \quad (11.70)$$

Используем простое приближение для поляризационного оператора частицы сорта "с":

$$\begin{aligned} \pi_c(\mathbf{q}, \omega_q) &= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3 \beta} \sum G_c^o(p + q) G_c^o(p) = \\ &= -2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{n_a(\mathbf{p} + \mathbf{q}/2) - n_a(\mathbf{p} - \mathbf{q}/2)}{i\omega_q - (\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})/m}, \end{aligned} \quad (11.71)$$

который вносит в перенормированный потенциал зависимость от частоты, что является следствием запаздывания взаимодействий в плазме. Далее потенциал \tilde{v}_{ab} будет изображаться волнистой линией. Для вычисления функции Грина используем аппроксимацию (11.52) для неприводимой и собственно энергетической части. Таким образом, в статическом высокотемпературном случае необходимо вычислить графики: Вначале вычислим мнимую часть $\Sigma^{(1)}$, так как вещественная приводит к пере-

$$\Sigma^{\text{0}} = \text{---} \overset{\text{wavy}}{\text{---}} \quad K_{PP'}^{(1)} = \text{---} \text{---} \text{---}$$

нормировке химического потенциала:

$$\Sigma^{(1)}(\mathbf{p}, \omega_p) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3 \beta} \sum_{\omega_q} \tilde{v}_q(\omega_q) G_{p+q}(\omega + \omega_q),$$

$$\omega_p = \frac{i\pi}{\beta}(2m+1), \quad \omega_q = \frac{i2\pi n}{\beta}. \quad (11.72)$$

В выражении для потенциала используем классический предел поляризационного оператора, сохраняя экспоненциальный множитель для обеспечения в дальнейшем сходимости при больших передачах импульса:

$$\tilde{v}_q(\omega_q) = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(q, x)}. \quad (11.73)$$

Вычисления $\tilde{v}_q(\omega_q)$ с учетом (11.70), (11.71) дают выражение классической продольной диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon(q, x) = 1 + \frac{\kappa^2}{q^2} [A(x) + iB(x)], \quad x = (\beta m_i)^{1/2} \frac{\omega}{q},$$

$$A(x) = 1 - x e^{-x^2/2} \int_0^x, \quad B(x) = \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} x e^{-x^2/2}. \quad (11.74)$$

Для определения дискретных сумм в дальнейшем используем функцию $n_\eta(\omega) = (e^{\beta\omega} - \eta)^{-1}$, имеющую полюсы в точках мнимой оси в комплексной плоскости ω :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \prod_{i=1}^N \frac{1}{\omega_n - a_i} = \sum_{i=1}^N \frac{n_\eta(\omega)}{\prod_{i \neq j} (a_i - a_j)},$$

$$\eta = +1, \omega_n = i \frac{(2n+1)\pi}{\beta}, \quad \eta = -1, \omega_n = i \frac{2\pi n}{\beta},$$

а для вычисления дискретных сумм по ω_n и аналитического продолжения по ω_m применим контурное интегрирование [149], но с функцией $n_\eta(\omega)$:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \varphi(\omega_n) \Psi(\omega_m + \omega_n) =$$

$$= \frac{1}{\pi} \int d\alpha n_\eta(\alpha) \left[\text{Im} \varphi^R(\alpha) \cdot \Psi^R(\alpha + \omega_m) + \varphi^R(\alpha + \omega_m) \text{Im} \Psi^R(\alpha) \right]. \quad (11.75)$$

Индексом R обозначены запаздывающие функции, аналитические в верхней полуплоскости. Изложенные результаты для мнимой части собственно энергетического оператора, ответственной за затухание, дают:

$$Im\Sigma_p^{(1)}(\omega_p) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha ImG_{p+q}(\omega_p) Im\tilde{v}_q(\alpha) \cdot \left[\frac{1}{e^{\beta\alpha} - 1} - \frac{1}{e^{\beta(\alpha-\omega_p)} - 1} \right]. \quad (11.76)$$

Далее следует аналитически продолжить функцию Грина с дискретных точек верхней мнимой полуоси на вещественную ось. Поскольку причинная функция Грина в (11.76) совпадает в верхней полуплоскости с запаздывающей, а в нижней - с опережающей функцией, то для аналитического продолжения в (11.76) следует произвести замену $\omega_p \rightarrow \omega + i0sgn\omega$. Для мнимых частей в (11.76) используем выражения:

$$Im\tilde{v}_q(\alpha) = -\frac{4\pi e^2}{q^2 |\varepsilon(q, x)|^2} \frac{\kappa^2}{q^2} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} x e^{-x^2/2 - \beta q^2/8m}, \quad (11.77)$$

$$ImG_p(\omega) = -\pi sgn\omega \cdot \delta(\omega - \varepsilon_p). \quad (11.78)$$

Подстановка в (11.76) и интегрирование по угловым переменным приводят к выражениям:

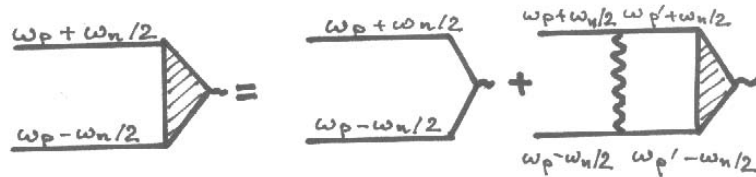
$$Im\Sigma_p^{(1)}(\omega) = \frac{sgn\omega}{2} \hbar\nu_p, \quad (11.79)$$

$$\nu_p = n_i \frac{p}{m} \left(\frac{2me^2}{\hbar^2}\right)^2 \int_0^\infty \frac{dq \cdot q}{p^2} e^{-\beta\hbar^2 q^2/8m} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{dx e^{-x^2/2}}{|q^2 \varepsilon(q, x)|^2}$$

ν_p можно интегрировать как частоту столкновений электронов с ионами. Перейдем к вычислению проводимости, которая определяется формулой (11.65), где двухчастичную функцию Грина $K_{pp'}(\omega_n)$ нужно аналитически продолжить по частоте $\omega_n \rightarrow \omega_i 0$. Для вычисления $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ определим вершину:

$$\mathbf{R}_p(\omega_p, \omega_n) = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p}' K_{pp'}(\omega_n). \quad (11.80)$$

Совокупность диаграмм $\Sigma^{(1)}$, $K_{pp}^{(1)}$ определяет уравнение для этой вершинной части: Жирная линия обозначает функцию Грина в среде, а точка - умножение на импульс



в соответствии с (11.80). Уравнение (11.3) в аналитической форме имеет вид:

$$\mathbf{R}_p(\omega_p, \omega_n) = \mathbf{p}g_p(\omega_p, \omega_n) + \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3 \beta} g_p(\omega_p, \omega_n) \tilde{v}_{p-p'}(\omega_p - \omega_{p'}) \mathbf{R}_p(\omega_{p'}, \omega_n), \quad (11.81)$$

$$g_p(\omega_p, \omega_n) = G_p\left(\omega_p + \frac{\omega_n}{2}\right) G_p\left(\omega_p - \frac{\omega_n}{2}\right). \quad (11.82)$$

Фактически это уравнение в методе функций Грина играет роль кинетического уравнения. Однако мы не будем прибегать к этой аналогии и найдем приближенное решение уравнения (11.3). Последнее в некотором смысле аналогично уравнению Дайсона для одночастичной функции Грина, полезная информация для которой содержится в ее полюсах. Их невозможно получить итерациями уравнения Дайсона, так как при этом не возникает полюсов больше, чем их было в нулевом приближении. Полюсы можно получить лишь введением неприводимой собственно - энергетической части, т.е. представления:

$$G_p^{-1} = G_0^{-1} - \Sigma(p).$$

Приравнявая к нулю знаменатель, находим спектр возбуждений системы. Поэтому и для вершинной части \mathbf{R}_p представим решение:

$$\mathbf{R}_p(\omega_p, \omega_n) = \frac{\mathbf{p}g_p(\omega_p, \omega_n)}{1 - L_p(\omega_p, \omega_n)} \quad (11.83)$$

где функция L_p удовлетворяет уравнению:

$$L_p(\omega_p, \omega_n)\mathbf{R}_p(\omega_p, \omega_n) = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3\beta} \sum_{\omega_{p'}} g_p(\omega_p, \omega_n) \tilde{v}_{pp'}(\omega_p - \omega_{p'})\mathbf{R}_{p'}(\omega_{p'}, \omega_n). \quad (11.84)$$

Соотношения (11.83), (11.84) являются точными, т.е. удовлетворяют уравнению (11.3). При получении приближенных решений ограничимся первым членом разложения для $\mathbf{R}_p^{(1)} = \mathbf{p}g_p(\omega_p, \omega_n)$. Для L_p тогда получим приближение:

$$L_p(\omega_p, \omega_n)\mathbf{R}_p = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3} \frac{\mathbf{p}'}{p} p^2 \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_{p'}} \tilde{v}_{p-p'}(\omega_p - \omega_{p'}) g_{p'}(\omega_{p'}, \omega_n).$$

При вычислении дискретной суммы по $\omega_{p'} = \frac{i(2k+1)\pi}{\beta}$ и аналитического продолжения по ω_n используем функцию $n_+(\omega_{p'})$:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_{p'}} \tilde{v}_{pp'}(\omega_p - \omega_{p'}) G_{p'} \left(\omega_{p'} + \frac{\omega_n}{2} \right) G_{p'} \left(\omega_{p'} - \frac{\omega_n}{2} \right) = \\ & = \frac{1}{2\pi i} \int_S \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} + 1} \tilde{v}_{p-p'}(\omega - \omega_p) G_{p'} \left(\omega + \frac{\omega_n}{2} \right) G_{p'} \left(\omega - \frac{\omega_n}{2} \right). \end{aligned}$$

$$\textcircled{\omega} \begin{array}{l} \frac{V^+}{\frac{G_1^+}{G_2^+}} \quad \omega = \alpha + \frac{\omega_n}{2} \\ \frac{V^+}{\frac{G_1^-}{G_2^+}} \quad \omega = \alpha + \omega_p \\ \frac{V^-}{\frac{G_1^-}{G_2^+}} \quad \omega = \alpha - \frac{\omega_n}{2} \\ \frac{V^-}{\frac{G_1^-}{G_2^-}} \end{array}$$

Рис. 11.7: Линии разреза контура интегрирования.

Контур интегрирования G в плоскости ω выбран в соответствии с областями аналитичности потенциала и функций Грина (рис. 11.7), где указано, какие функции терпят разрывы на линиях $G_1 = G_{p'} \left(\omega + \frac{\omega_n}{2} \right)$, $G_2 = G_{p'} \left(\omega - \frac{\omega_n}{2} \right)$. Для функций Грина используем вычисленное $\Sigma_p^{(1)}(\omega)$:

$$G_p \left(\omega_p \pm \frac{\omega_n}{2} \right) = \left[\left(\omega_p + \frac{\omega_n}{2} \right) - \varepsilon_p + \frac{\hbar\nu_p}{2} \operatorname{sgn} \left(\omega_p \pm \frac{\omega_n}{2} \right) \right]^{-1}$$

Интегрирование по p' можно выполнить, замыкая контур по верхней или нижней дуге:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_{p'} \left(\omega_p + \alpha + \frac{\omega}{2} - \varepsilon_{p'} + \frac{i\hbar\nu}{2} \right)^{-1} \left(\omega_p + \alpha - \frac{\omega}{2} - \varepsilon_{p'} - \frac{i\hbar\nu}{2} \right)^{-1} = \frac{i\pi}{\omega + i\hbar\nu}.$$

Отсюда, в частности, видно, что иная последовательность контуров не дает вклада, так как полюсы знаменателя будут лежать по одну сторону оси. Это значит, что при $|\omega_p| > \omega_n/2$, $L_p^{(1)} = 0$. Для $|\omega_p| > \omega_n/2$ получим:

$$L_p^{(1)}(\omega_p, \omega_n) = \frac{i\hbar\nu_p - i\hbar\nu_{tr}}{\omega + i\hbar\nu_p}. \quad (11.85)$$

Здесь ν_p определяется (11.79), а транспортная частота столкновений равна:

$$\nu_{tr} = n_i \frac{p}{m} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \left(\frac{e^2}{\varepsilon_p} \right)^2 \int_0^\infty dq \cdot q^3 e^{-\beta\hbar^2 q^2/8m} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty \frac{dx e^{-x^2/2}}{|q^2 \varepsilon(q, x)|^2}. \quad (11.86)$$

В (11.83) фигурирует $g_p(\omega_p, \omega_n)$, которая легко вычисляется аналогичными методами:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_p} g_p(\omega_p, \omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum G_p \left(\omega_p + \frac{\omega_n}{2} \right) \left(\omega_p - \frac{\omega_n}{2} \right) = \frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p} \cdot \frac{\omega}{\omega + i\nu}.$$

При этом выполнено аналитическое продолжение $\omega_n = \omega + i0$.

После подстановки всех выражений получим проводимость:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{e^2}{im^2} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \cdot \frac{p_\mu p_\nu}{\omega + i\nu_{tr}} \cdot \frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p} - \frac{ine^2}{m\omega} \delta_{\mu\nu}.$$

В пространственно однородном случае для статической проводимости получаем:

$$Re\sigma(0) = \frac{e^2}{3m^2} \int \frac{d\mathbf{p} \cdot p^2}{(2\pi\hbar)^3} \left(-\frac{\partial n_p}{\partial \varepsilon_p} \right) \frac{1}{\nu_{tr}}, \quad n_p = e^{\beta(\mu_e - \varepsilon_p)}. \quad (11.87)$$

Как и следовало ожидать, проводимость определяется транспортным сечением рассеяния. Таким образом, в высокотемпературной плазме формула (11.87) с частотой (11.86) дает проводимость. Интеграл в (11.86) можно вычислить контурным интегрированием, разлагая подынтегральное выражение по малому параметру $\eta \ll 1$ для бесконечно тяжелых ионов. После вычислений (11.87) получим:

$$Re\sigma(0) = \frac{ne^2}{m\nu_{ei}^{tr}}, \quad \nu_{ri}^{tr} = \frac{2}{3} n_i \pi (\beta e^2)^2 \left(\frac{8}{m\pi} \right)^{1/2} \left[\ln \frac{1}{\eta} - \frac{C}{2} + \frac{1}{2} \ln 2 + D(\eta^2 \ln \eta) \right]. \quad (11.88)$$

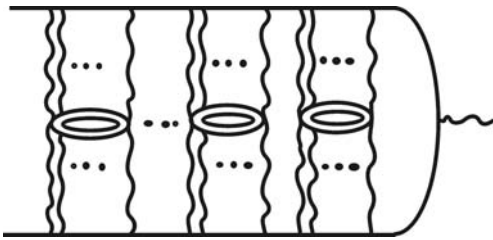


Рис. 11.8: Вершинная часть, определяющая электропроводность плазмы

В низкотемпературном

случае, кроме того, нужно учесть графики, Здесь $C = 0,5772$ - постоянная Эйлера. Отметим, что при вычислениях не производилось никаких обрезаний, и по смыслу используемых приближений результат эквивалентен квантовому варианту уравнения Ленарда-Балеску. Из анализа графиков в первых порядках теории возмущений следует, что для получения проводимости и статическом пределе нужно суммировать бесконечный ряд одного порядка по взаимодействию и всех порядков по $(\omega\tau)^{-1}$, т.е. лестничную вершину.

приводящие к замене борновского приближения на точное в задаче рассеяния. Таким образом, для $\omega\tau \ll 1$, $kT < R_y$ необходимо вычислить вершину, представленную на рис. 11.8. Рассмотрим, какую при этом нужно использовать аппроксимацию для собственно - энергетической части. При вычислении проводимости высокотемпературной плазмы в $\Sigma^{(1)}$ появилось полное сечение рассеяния (11.79), которое впоследствии сократилось с таким же сечением в вершине (11.85), в результате чего в формулу для проводимости вошло транспортное сечение рассеяния. Это сокращение произошло не случайно, оно показывает эквивалентность аппроксимаций Σ и R . Такие эквивалентные приближения можно найти и в общем случае. Пусть взаимодействие электрона с рассеивателем происходит посредством некоторой T -матрицы. Заметим, что в данном случае фактически суммируются по $(\omega\tau)^{-1}$ фрагменты аналогично:

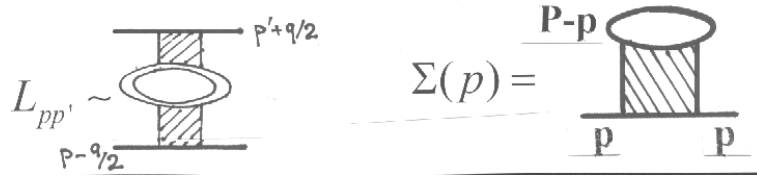


Рис. 11.9: Диаграммы второго порядка в функции Грина $K_{\mu\nu}(u)$

$$L_{pp'} = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'}{p^2} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3 \beta} \sum_{iP_0} G^i(P - p) G^i(P - p') T(P, p, p') T(P, p', p). \quad (11.89)$$

По нулевым компонентам импульса $|iP_0 = \omega_p|$ производится суммирование. Выбор T -матрицы определяет аппроксимацию для собственно - энергетической части. При ее нахождении воспользуемся одним из тождеств Уорда [46]:

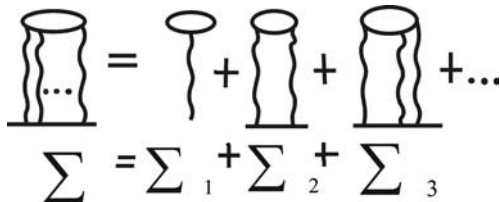
$$\frac{\partial \Sigma(p)}{\partial \mathbf{p}} = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3 \beta} \sum_{iP_0} T(pp', p'p) \frac{\hbar^2 \mathbf{p}}{m} G^2(p'). \quad (11.90)$$

Откуда следует приближение для

$$\Sigma(p) = \int \frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3 \beta} \sum_{iP_0} G(P - p) T(P, p, p'). \quad (11.91)$$

При вычислении мнимой части воспользуемся оптической теоремой [8]:

$$ImT(\omega - i0) = T(\omega + i0) ImG(\omega - i0) T(\omega - i0). \quad (11.92)$$



Производя расчеты, аналогичные задаче с высокотемпературной проводимостью, можно убедиться в том, что и в этом случае проводимость будет определяться транспортным сечением. Отметим, что полная система уравнений для двухчастичных функций

Рис. 11.10: T -матрица для динамического потенциала взаимодействия

Грина, удовлетворяющая тождествам Уорда для электрон-фотонной системы в плазме, может быть приближенно сведена к уравнениям типа (11.70), (11.81), графически представленные на рис. 11.3, . Поскольку в дальнейшем будут использоваться аппроксимации типа (11.12), то при вычислении L_p можно ограничиться частью, пропорциональной транспортному сечению рассеяния. В низкотемпературной плазме нужно

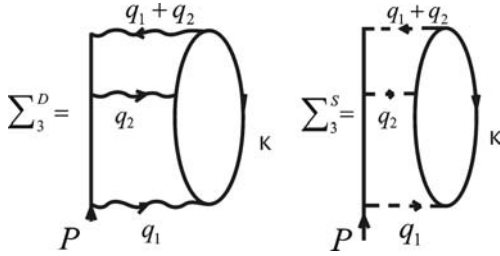


Рис. 11.11: Диаграммы третьего порядка для динамического и статического потенциалов

суммировать лестничные графики с динамическим потенциалом $\tilde{v}(q)$, но точно вычислить соответствующую T -матрицу не удастся, поэтому рассмотрим возможность замены динамической лестницы на статическую. Рассмотрим ряд, представленный графически на рис.11.10. Член Σ_1 в этом ряду выпадает из условия электронейтральности. Σ_1 было вычислено в задаче о высокотемпературной проводимости. Рассмотрим отличие в диаграммах третьего порядка между динамическим и статическим потенциалами, показанное графически на рис.11.10. В правом графике на рис. 11.11 нулевые компоненты $p_0 = i\omega_p, k_0 = i\omega_k, q_0 = i\omega_q$, а в левом - отличны от нуля все нулевые компоненты импульсов. Здесь пунктирная линия означает статический экранированный потенциал. Аналитическое выражение графиков (11.11) в импульсном представлении:

$$\sum_3^D(p) = 2 \int \frac{d\mathbf{q}_1 d\mathbf{q}_2 d^3k}{[(2\pi)^3 \beta]^3} \sum_{q_1^0 q_2^0 k} \tilde{v}(q_1) \tilde{v}(q_2) \tilde{v}(q_2 - q_1) \cdot G(p - q_1) G(p - q_1 - q_2) G(k + q_1) G(k + q_1 + q_2) G(k).$$

Дискретная сумма по нулевой компоненте k^0 легко вычисляется. В классическом пределе $|e^{\beta\mu} \ll 1|$.

$$\frac{1}{\beta} \sum_{k^0} G(k) G(k + q_1) G(k + q_1 + q_2) = e^{\beta(\mu\epsilon_k)} \left[\frac{1}{\Delta_1 \Delta_2} - \frac{e^{-\beta\Delta_1}}{\Delta_1 \Delta_3} + \frac{e^{-\beta\Delta_2}}{\Delta_2 \Delta_3} \right],$$

$$\Delta_1 = \epsilon_{k+q_1} - \epsilon_{k-q_1^0}, \quad \Delta_2 = \epsilon_{k+q_1+q_2} - \epsilon_{k-q_1^0-q_2^0}, \\ \Delta_3 = \epsilon_{k+q_1+q_2} - \epsilon_{k+q_1-q_2^0}, \quad \Delta_3 = \Delta_2 - \Delta_1.$$

После этого определяем интеграл по \mathbf{k} :

$$2 \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{\beta(\mu\epsilon_k)} \left[\frac{1}{\Delta_1 \Delta_2} - \frac{e^{-\beta\Delta_1}}{\Delta_1 \Delta_3} + \frac{e^{-\beta\Delta_2}}{\Delta_2 \Delta_3} \right] \simeq \frac{n\beta^2}{2}.$$

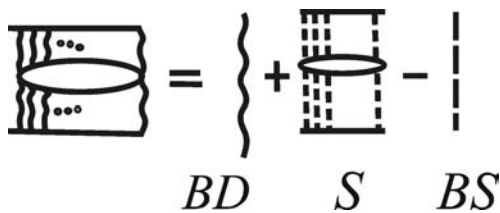


Рис. 11.12: Приближение Хаббарда для T-матрицы.

Дискретные суммы по q_1^0, q_2^0 и аналитическое продолжение осуществляется как обычно, интегрированием по контуру, внутри которого аналогичны потенциалы и функции Грина. В результате получим:

$$Im \sum_3^D = a \frac{e^2}{\hbar V_T} \ln \eta Im \sum_2^D,$$

где a - множитель порядка, единицы. Для статического потенциала вычисления проще. Разность между диаграммами (11.11) тоже порядка (11.12). В более высоких порядках в ряду (11.10) получим еще более высокие степени борновского параметра $e^2/\hbar v_T$. Это означает, что для нековантовой $|\eta \ll 1|$ -плазмы, пренебрегая связанными состояниями, можно использовать аппроксимации, представленные на рис.11.12, 11.13.

В соответствии с предыдущими методами решения в формулу для проводимости войдет транспортная частота, состоящая из трех членов, выражающих борновское приближение для динамического $|BD|$, статического $|BS|$ потенциалов и точную амплитуду

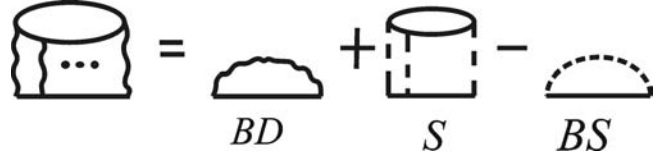


Рис. 11.13: Приближение Хаббарда для собственно-энергетической части.

рассеяния на экранированном потенциале $|S|$. Подобный результат, но другим методом был получен в [63]. Первый член обоих разложений (11.12) был вычислен в задаче о высокотемпературной проводимости. Вычисление третьих членов для транспортной частоты столкновений дает:

$$\nu_{ei}^{BS} = \frac{2}{3} n_i \pi (\beta e^2)^2 \left(\frac{8}{m\pi\beta} \right)^{1/2} L^{BS},$$

$$L^{BS} = \int_0^\infty dq q^3 e^{-\eta^2 q^2/4} = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} e^{\eta^2/2} E_i \left(-\frac{\eta^2}{2} \right) - \frac{\eta^2}{4} e^{\eta^2/4} E_i \left(-\frac{\eta^2}{4} \right). \quad (11.93)$$

При малых значениях $\eta \ll 1$ можно использовать асимптотику:

$$L^{BS} \simeq \ln \frac{1}{\eta} - \frac{1}{2} - \frac{C}{2} - \frac{1}{2} \ln 2. \quad (11.94)$$

Второй член представляет замену борновского приближения для рассеяния на точное, поэтому при его вычислении можно использовать результаты решения задачи рассеяния на экранированном потенциале. В чисто классической области угол рассеяния связан с прицельным параметром $\rho = r/r_D$ соотношений [18]:

$$\Theta = \frac{\gamma}{2\beta\epsilon_p} K_0(\rho), \quad K_0(\rho) = 2 \int_1^\infty \frac{e^{-\rho t}}{(t^2 - 1)^{1/2}} dt. \quad (11.95)$$

где ϵ_p - энергия налетающей частицы, K_0 - модифицированная функция Бесселя. Для транспортного сечения после усреднения по максвелловскому распределению получим асимптотику:

$$Q_{tr} = \pi (\beta e^2)^2 \left[\ln \gamma^{-1} - 2C + 2 \ln 2 - \frac{1}{2} \right]. \quad (11.96)$$

С учетом квантовых эффектов в задаче рассеяния можно использовать результаты [160]:

$$Q_{tr} = \pi (\beta e^2)^2 \left[\ln \gamma^{-1} - 2C + 2 \ln 2 - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} e^{\frac{\eta^2}{4} \exp 2C} E_1 \left(\frac{\eta^2}{4} e^{2C} \right) \right]. \quad (11.97)$$

11.4 Вычисление коэффициентов переноса методом функций Грина

В разделе изложены результаты расчетов коэффициентов переноса методом функций Грина. В работах [149] - [150] с помощью метода неравновесного статистического оператора получена общая формула для изотермической электропроводности, выраженная через корреляционную функцию сил. При этом обращается внимание на то, что в корректных формулах необходимо учитывать взаимодействие системы с термостатом.

В работе [98] теория Кубо применена для вычисления электропроводности неидеальной плазмы с учетом динамического экранирования и короткодействующих сил с использованием потенциала Глаубермана-Юхновского. Высокочастотная электропроводность электронного газа вычисляется относительно проще, чем для двухкомпонентной плазмы, поэтому в [158] вычислена высокочастотная электропроводность двумерного электронного газа, взаимодействующего с оптическими фононами, а в [159] - для двухкомпонентного электронного газа. Теоретические расчеты электропроводности твердых тел имеют много общего с расчетами газовой плазмы, поэтому полезная информация может быть получена из публикаций, посвященных электронной теории твердых тел [133], [150]. Наиболее подробные расчеты методом функций Грина в области частичной ионизации выполнены для водородной плазмы [85]. Метод корреляционных функций сил использован в [148] для вычисления электропроводности кулоновской системы, где учтены эффекты динамического экранирования, корреляция ионов, отклонения от потенциала взаимодействия частиц на малых расстояниях от кулоновского и квантовые явления. Показано, что эти эффекты приводят к уменьшению электропроводности полностью ионизованной плазмы по сравнению с формулой Спитцера. Работа [141] посвящена выводу квантовой цепочки кинетических уравнений, аналогичных цепочке Боголюбова, в [88] на основе метода функций Грина развита квантовая кинетическая теория временных корреляционных функций, которая применена для вычисления электропроводности плотной сильнонеидеальной плазмы (Strongly Coupled Plasma). В пределе слабого взаимодействия получено обобщение формулы Займана для электропроводности жидких металлов, а для сильного взаимодействия получен результат, обобщающий формулу (11.87) на случай сильного взаимодействия ионов. На основе развитой теории в [88] вычислена частота электронных столкновений в плазме в модели, учитывающей ион-ионные корреляции, где используются результаты численного моделирования однокомпонентной плазмы. Расчеты выполнены для водородной плазмы и щелочных металлов [130] при $\Gamma \leq 2$ в области перехода газ-жидкость. Метод парциальных волн для обрезанного кулоновского потенциала применен в [118] для расчета фаз рассеяния и вычисления электропроводности полностью ионизованной плазмы. Формализм функций Грина последовательно развивался в [118], [92] для расчетов динамического структурного фактора двухкомпонентной плазмы с использованием потенциала Дейча:

$$\Phi_{ab}(r) = \frac{Z_a Z_b e^2}{r} (1 - e^{-r/\lambda_{ab}}).$$

Расчеты динамического структурного Фактора проводились с учетом численных расчетов, выполненных методом Монте-Карло [109].

В работе [86] метод функций Грина применен для учета эффектов многократного рассеяния при столкновениях частиц. Теоретические результаты совпадают с приближением Хаббарда, в работе учтена возможность образования связанных состояний. Высокочастотная электропроводность и диэлектрическая проницаемость плазмы с сильным взаимодействием частиц вычислены в [131] на основе метода моментов с использованием правил сумм для кулоновской системы. В работе [137] вычислена электропроводность плотной горячей плазмы на основе обобщения формулы Займана на случай сильного взаимодействия электронов с рассеивателями. Подводя итоги современному состоянию методов расчета электронных коэффициентов переноса в низкотемпературной плазме, отметим, что в области сильного взаимодействия частиц и вблизи фазового перехода газ-жидкость надежных способов вычисления электропроводности нет, а в слабоидеальной плазме применение изложенных выше методов расчета дает приемлемую точность, которая определяется точностью сечений элементарных процессов взаимодействия электронов с атомами и молекулами.

Глава 12

Электронные коэффициенты переноса в плазме

12.1 Электронные коэффициенты переноса в химической модели

В 10.2 были изложены результаты кинетической теории газов, справедливой в предельном случае локально сильных потенциалов при $na^3 \ll 1$ (a - радиус действия потенциала), и плазмы для интегрально слабых потенциалов ($\Gamma \ll 1$). В 11.2 проанализировано состояние методов расчета коэффициентов переноса, выраженных через временные корреляционные функции. Для систем со слабым межчастичным взаимодействием оба подхода к определению переносных свойств эквивалентны, но в отдельных случаях, следуя второму подходу, удастся аналитически или численно рассчитать переносные коэффициенты для систем с сильным взаимодействием. Последнее возможно для слабоионизованной плазмы, однокомпонентной плазмы, плотных нейтральных систем [35], [11], [109], [161], [128]. Для вычисления переносных коэффициентов многокомпонентной, химически реагирующей, неидеальной плазмы строгие методы применить не удастся. Поэтому в данном параграфе на основе модельных представлений рассмотрены электронные свойства переноса неидеальной полностью, частично и слабо ионизованной плазмы, в последующем — свойства переноса, обусловленные тяжелыми частицами.

Для расчета переносных свойств неидеальной плазмы обычно применяется химическая модель, согласно которой плазма состоит из определенного количества компонентов, свободных электронов, ионов, атомов, молекул и т. п. Проанализируем влияние различных эффектов на электронные коэффициенты переноса частично ионизованной плазмы с сильным кулоновским взаимодействием — электропроводность и термо-э. д. с., используя формулы Фроста (13.39), которые применительно к неидеальной плазме следует рассматривать как модельные. Частота столкновений электронов с тяжелыми рассеивателями

$$\nu_e = v \sum_n Q_m(v) n_n + \sum_i \gamma_{\sigma,\alpha}^{-1}(Z_i) n_i \frac{2\pi}{V^3} \left(\frac{Z_i e^2}{m_e} \right)^2 L(\Gamma). \quad (12.1)$$

Здесь $L(\Gamma)$ — кулоновский логарифм, описывающий коллективные эффекты в плазме, $\gamma_{\sigma,\alpha}$ поправочные коэффициенты (§2.6). Сравнение данных по электропроводнос-

ти, рассчитанных по (13.39), (12.1) и принятому варианту состава (§1.7)

$$L(\Gamma) = \ln[1 + (3\sqrt{2/\Gamma})^2]$$

с экспериментальными результатами [54], [23], [19] показывает превышение теории над экспериментом. Совпадения нетрудно добиться, варьируя $L(\Gamma)$, но поскольку данная процедура не имеет определенного физического смысла, основное внимание далее уделено вкладу некулоновских эффектов (рассеянию электронов на возбужденных атомах, неупругим столкновениям электронов, «конечному размеру» ионов и т. п.) в частоту столкновений. Проявление некулоновских эффектов отличает электронный перенос в неидеальной плазме и не связано непосредственно с дальнедействующим характером кулоновских сил. Частично ионизованная неидеальная плазма в экспериментах [54], [23], [19] имеет температуру 1—3 эВ. Если вещество плазмы обладает малым потенциалом ионизации (например, щелочной металл), то значительная доля нейтральных атомов в плазме возбуждена. Известен результат измерения сечения рассеяния электрона на атоме натрия в первом возбужденном состоянии ($3p$) для энергии электрона 4 эВ [57]: сечение $e - 3s$ в 2—3 раза меньше сечения $e - 3p$. Столь существенное отличие указывает на необходимость модификации выражения (12.1) для частично ионизованной плазмы щелочных металлов:

$$\nu_e \sim v \frac{n_n}{Q_n} \sum_i g_i Q_{mei} \exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right). \quad (12.2)$$

Здесь Q_n — статсумма нейтрального атома, Q_{mei} — транспортное сечение упругого рассеяния электрона на атоме в i -м возбужденном состоянии, энергия и статистический вес которого — E_i , g_i . В частично ионизованной плазме инертных газов при температурах 1—3 эВ доля возбужденных атомов ничтожна и их влиянием на длину свободного пробега электронов следует пренебречь. Исследуем подробнее влияние рассеяния электронов возбужденными атомами на частоту столкновений на примере частично ионизованной цезиевой и литиевой плазмы. В интервале температур 1—3 эВ при расчете электронных свойств переноса для частично ионизованной цезиевой плазмы необходимо принимать во внимание упругое рассеяние электронов на $6s$, $6p$, $5d$ состояниях атома Cs (энергии этих состояний 0, 1,4, 1,8 эВ соответственно), а для плазмы лития рассеяние на — $2s$, $2p$ состояниях Li (энергии 0, 1,8 эВ). В работе [48] сечения рассеяния электронов на возбужденных атомах лития и цезия вычислялись в приближениях Борна и Глаубера. Основанием для использования указанных приближений является хорошее совпадение расчетных и экспериментальных данных по упругому рассеянию электронов с энергией >1 эВ на атомах Li , Na , K в основном состоянии [162]. В приближении Глаубера пренебрегается обменным взаимодействием налетающего и валентного электронов и поляризацией орбиты последнего. Оценки показывают, что эти упрощения справедливы для $E > 1$ эВ. Предполагая, что атом щелочного металла состоит из остова с зарядом $+1e$ и валентного электрона, запишем амплитуду рассеяния электрона на атоме ($-F_{nlm}$) в приближении Глаубера (в.а.е.):

$$F_{nlm} = \frac{ik}{2\pi} \int u_{nlm}(\mathbf{r}) \Gamma(\mathbf{b}, \mathbf{r}) u_{nlm}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{b}} d^2b d\mathbf{r}, \quad \Gamma(\mathbf{b}, \mathbf{r}) = 1 - \exp[i\chi(\mathbf{b}, s)],$$

$$\chi(\mathbf{b}, \mathbf{s}) = -\frac{1}{v} \int_{-\infty}^{\infty} V(\mathbf{b}, \mathbf{r}, \xi) d\xi, \quad V = \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - \frac{1}{r'}, \quad (12.3)$$

где u_{nlm} - волновая функция валентного электрона, v, k — скорость и волновой вектор рассеивающегося электрона, $q = 2k \sin \theta/2$, θ - угол рассеяния, n, l, m - квантовые числа. Выражение (12.3) записано в системе координат, начало которой помещено в ядре атома, $z \parallel \mathbf{k}, \mathbf{r}, \mathbf{r}'$ — радиус-векторы атомного и рассеивающегося электронов. Разложим их: $\mathbf{r} = \mathbf{s} + \mathbf{z}, \mathbf{r}' = \mathbf{b} + \xi$, где \mathbf{s}, \mathbf{b} — проекции \mathbf{r}, \mathbf{r}' на xy — плоскость. При расчете сечений $e|Li, Cs$ использовались волновые функции валентного электрона, рассчитанные по методу Хартри—Фока (см. §1.4). Если квадрат радиальной части волновой функции представить в виде

$$R_{nl}^2 = \sum_{t=1}^{\tilde{m}} a_t^{nl} r^{c_t+2l+1} e^{-b_t^{nl} r},$$

то равенства (12.3) могут быть упрощены, так для F_{n00} имеем:

$$F_{n00} = \frac{1}{4} \sum_{t=1}^{\tilde{m}} a_t^{n0} (-1)^{c_t+2l-1} \left. \frac{\partial^{c_t-1} \tilde{j}_0(q, \lambda)}{\partial \lambda^{c_t-1}} \right|_{\lambda=b_t^{n0}},$$

$$\tilde{j}_0(q, \lambda) = 64\pi i k \int_0^{\pi/2} d\theta \frac{\cos \theta \lambda (\lambda^2 - 2q^2 \operatorname{ctg}^2 \theta)}{\sin \theta (\lambda^2 + 2q^2 \operatorname{ctg}^2 \theta)^4} \times$$

$$\times \left[1 - \frac{1}{2\pi} \left(\frac{1}{\cos \theta} \right)^{2in} \int_0^{2\pi} d\Phi (1 - \sin 2\theta \cos \Phi)^{in} \right]. \quad (12.4)$$

Здесь c_t — натуральные числа, $n = l/v$, F_{nlm} для $l, m \neq 0$ представлены аналогично (12.4) [48]. Полное и транспортное сечения упругого рассеяния стандартным образом

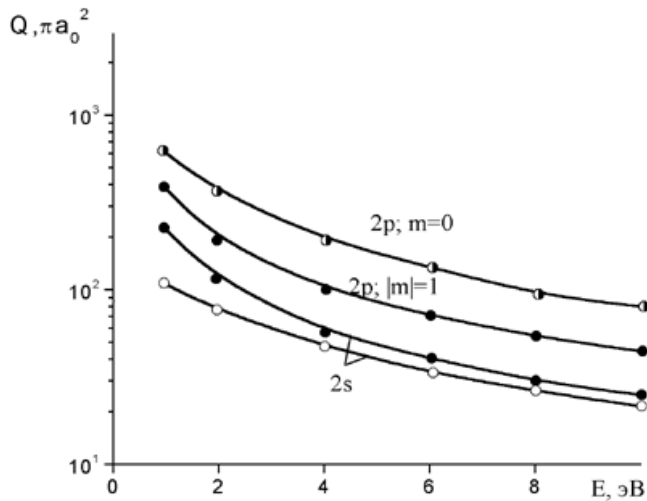


Рис. 12.1: Сечения упругого рассеяния электронов на $2s, 2p$ состояниях атома лития: 1, 4 - метод Борна, 2, 3 - метод Глаубера

рассчитываются через амплитуду рассеяния [37]. Результаты вычисления полного Q_{nlm} и транспортного Q_{nlm}^m , сечений упругого рассеяния электронов методами Борна и Глаубера в интервале энергий 1—10 эВ на атомах цезия и лития в основном и возбужденных состояниях иллюстрируются на рис. 12.1, 12.2, из которых видно, что сечения упругого рассеяния на основном состоянии в 2—3 раза меньше сечений рассеяния на возбужденных состояниях. С учетом этого эффекта рассчитаны [48] изотермы электропроводности (рис. 12.3, 12.1). Следующим некулоновским эффектом, оказывающим влияние на коэффициенты переноса плазмы, является отличие потенциала взаимодействия электрона и иона U_{ei} на малых расстояниях от ядра иона от закона $|Z_i e^2/r$. Так, характерные размеры ионных остовов тяжелых ионов Cs^+, Xe^+ составляют $\sim 5a_0$, что сравнимо с радиусом экранирования зарядов в плазме. В работе [50] влияние конечного размера иона на частоту столкновений электронов учтено методом квантового дефекта [57], который основан на аналогии движения медленного

взаимодействия электрона и иона U_{ei} на малых расстояниях от ядра иона от закона $|Z_i e^2/r$. Так, характерные размеры ионных остовов тяжелых ионов Cs^+, Xe^+ составляют $\sim 5a_0$, что сравнимо с радиусом экранирования зарядов в плазме. В работе [50] влияние конечного размера иона на частоту столкновений электронов учтено методом квантового дефекта [57], который основан на аналогии движения медленного

свободного электрона и слабосвязанного электрона в поле ионного остова. Радиальная часть волновой функции свободного электрона с импульсом \mathbf{k} и орбитальным моментом l при рассеянии на ионе с зарядом $Z_i e$ имеет асимптотический вид $r \rightarrow \infty$ [37]:

$$R_{hl} \sim \frac{1}{r} \sin \left[kr + \frac{Z_i}{k} \ln kr - \frac{\pi l}{2} + \arg \Gamma \left(1 + l - \frac{i Z_i}{k} \right) + \gamma_l \right], \quad (12.5)$$

где $\gamma_l = \lim_{k \rightarrow 0} \pi \Delta (n \rightarrow \infty) k^{2l+1}$. Здесь квантовый дефект $\Delta = n - n'$, n — главное квантовое число состояния, энергия связи электрона в котором равна $(2n'^2)^{-1}$. Поправка к транспортному кулоновскому сечению, определенная методом квантового дефекта, составляет [50] $\sim 25A^2$ для ионов Cs^+ , Xe^+ при энергиях электрона 1,5—2 эВ. Ограничения метода квантового дефекта заключаются в следующем, соотношение (12.5) справедливо при $E \rightarrow 0$, потенциал U_{ei} является кулоновским вдали от ядра

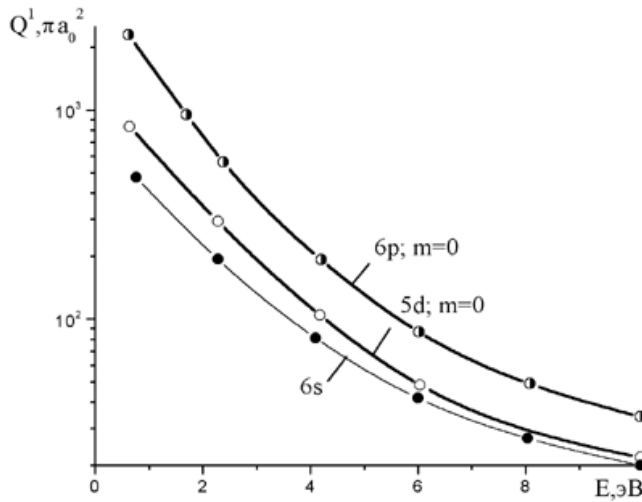


Рис. 12.2: Сечения упругого рассеяния электронов на $6s, 6p, 5d$ состояниях атома цезия (метод Борна)

в заданном потенциале. Запишем уравнение для фазы рассеяния $\delta_l(r)$:

$$\frac{d}{dr} \delta_l(r) = -\frac{1}{k} U_{ei}(r) [\cos \delta_l(r) j_l(kr) - \sin \delta_l(r) n_l(kr)]^2,$$

где $\delta_l(0) = 0$. В этом уравнении $j_l(x), n_l(x)$ — известные функции Риккати—Бесселя [7], асимптотическое выражение для радиальной части волновой функции определяется фазой рассеяния ($r \rightarrow \infty$) $r R_{hl} \rightarrow \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l)$. Использование метода фазовых функций требует аккуратного задания близкодействующей части U_{ei} , дальнедействующую часть U_{ei} согласно модельным представлениям следует выбрать в форме дебаевского потенциала. Учет «конечного размера» ионов приводит к уменьшению расчетных значений электронных коэффициентов переноса и проявляется тем сильнее, чем больше степени ионизации и неидеальности плазмы. Обсудим влияние неупругих столкновений электронов таких, как возбуждение и ионизация атомов электронным ударом на частоту столкновений электронов с тяжелыми рассеивателями. Данные по сечениям возбуждения и ионизации щелочных атомов электронным ударом, представленные в литературе, позволяют заключить, что сечения возбужде-

иона. Влияние конечного размера иона Cs^+ на сечение транспортного рассеяния рассмотрено в работе [44] по упрощенной модели: применялось борновское приближение, потенциал U_{ei} на малых расстояниях от ядра иона аппроксимировался экспоненциальным потенциалом, при этом получено $Q_m \sim 50A^2$ при $E \sim 2$ эВ. Описание двухчастичного процесса рассеяния электрона на ионе, свободное от недостатков метода квантового дефекта и модели [44], возможно на основе метода фазовых функций [7], который позволяет точно вычислить фазу рассеяния частицы при ее движении в

ния при соответствующих энергиях налетающего электрона сравнимы по величине с упругими сечениями рассеяния электронов на атомах в основном состоянии [57].

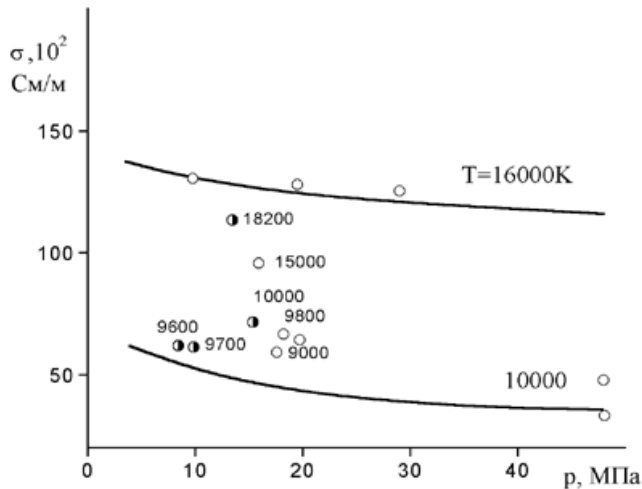


Рис. 12.3: Сравнение рассчитанных и измеренных значений электропроводности цезиевой плазмы вдоль изотерм (экспериментальные точки - данные [61])

Изменение частот столкновений, исходя из физических соображений [47], опишем добавкой к ν_e члена вида $\nu_e \sim v \sum_{\alpha} Q_{ea}(v)n_{\alpha}$, где Q_{ea} — сечение возбуждения нейтрала сорта a (атом в разных возбужденных состояниях здесь принадлежит различным сортам), n_{α} — концентрация нейтралов сорта a .

Следующим эффектом, имеющим значение в неидеальной полностью или частично ионизованной плазме, является корреляция частиц, на которых происходит рассеяние электронов. Вклад корреляции зависит от степени упорядоченности рассеивателей. В предельном случае, когда рассеиватели полностью упорядочены, как это имеет место в металле, электрон рассеивается одновременно на всей цепочке атомов, поэтому (вследствие интерференции) длина пробега электронов резко увеличивается. Этим эффектом, собственно, объясняется высокая электропроводность металлов и в твердом и в жидком состояниях.

В плотном газе или плазме имеется частичная упорядоченность, и эффекты интерференции должны приводить к увеличению длины пробега электронов и, соответственно, к увеличению проводимости плазмы.

Эффекты корреляции учитываются формулой Займана для частоты столкнове-

Таким образом, из-за высокой заселенности возбужденных уровней нейтральных атомов в частично ионизованной неидеальной плазме щелочных металлов в условиях [54], [23], [19], указанный неупругий процесс заметно увеличивает частоту столкновений электронов и, соответственно, уменьшает коэффициенты переноса. Изменение частот столкновений, исходя из физических соображений [47], опишем добавкой к ν_e члена вида $\nu_e \sim v \sum_{\alpha} Q_{ea}(v)n_{\alpha}$, где Q_{ea} — сечение возбуждения нейтрала сорта a (атом в разных возбужденных состояниях здесь принадлежит различным сортам), n_{α} — концентрация нейтралов сорта a .

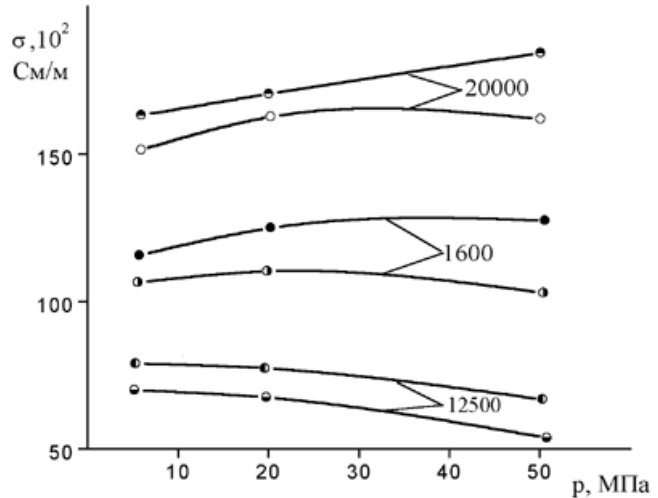


Рис. 12.4: Изотермы электропроводности литиевой плазмы без учета (верхняя кривая) и с учетом рассеяния на возбужденных атомах

ний электрона [168] с другими частицами

$$\nu_e \sim vn_i \frac{1}{4k} \int_0^{2k_{\max}} Q_m(k) a(k) k^2 dk, \quad (12.6)$$

где структурный фактор $a(k)$ определяется равновесной корреляционной функцией ионов $g_{ii}(r)$ [168]:

$$a(k) = 1 + 4\pi n \int \frac{\sin kr}{kr} [g_{ii}(r) - 1] r^2 dr. \quad (12.7)$$

Расчет влияния корреляции на кулоновский логарифм с нелинейной дебаевской корреляционной функцией [168]

$$g_{ii}(r) = \exp \left[-\frac{\beta e^2}{r} \exp(\kappa r) \right]$$

Понятие состава неидеальной частично ионизованной плазмы не является однозначным. Для электронного переноса в частично ионизованной плазме инертных газов в интервале параметров, рассматриваемом в данном параграфе, несущественны рассеяние электронов на возбужденных атомах и неупругие столкновения с частицами плазмы, следовательно, в этом случае целесообразно сформулировать модель, не использующую понятия состава плазмы.

Опишем одну из возможных одноэлектронных моделей такого рода, основанную на представлениях квазиклассической теории непрерывного протекания [73]. Положим, что плазма состоит из электронов и ионов. Согласно теории непрерывного протекания (ТКП), электрон движется «разрешенными» путями в случайном, эффективном потенциале $V(r)$, создаваемом флуктуациями плотности ионов, флуктуации $V(r)$ не зависят от присутствия электрона в данной точке $V(r) = \sum_{\alpha=1}^N V_{ei}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_\alpha)$. Здесь \mathbf{R}_α — радиус-вектор иона, суммирование проводится по всем ионам, V_{ei} — потенциал взаимодействия электрон-ион.

Согласно ТКП, разрешенные пути удовлетворяют условию $V < E$ (E —энергия электрона, остающаяся при движении постоянной). Для любой энергии E все пространство разделено на разрешенное и запрещенное, доля разрешенного пространства (обозначим ее $s(E)$) равна $\int_{-\infty}^E F(V) dV$. $F(V)$ - функция распределения потенциала, по определению [73] :

$$F(V) = \frac{1}{\Omega^N} \int d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N W(\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N) \delta(V - V(r)),$$

W — вероятность данной конфигурации ионов в случайном потенциале, Ω — объем системы. $F(V)$ имеет гауссов вид при условии, что в сфере действия потенциала U_{ei} находится достаточно много ионов и $W = 1$:

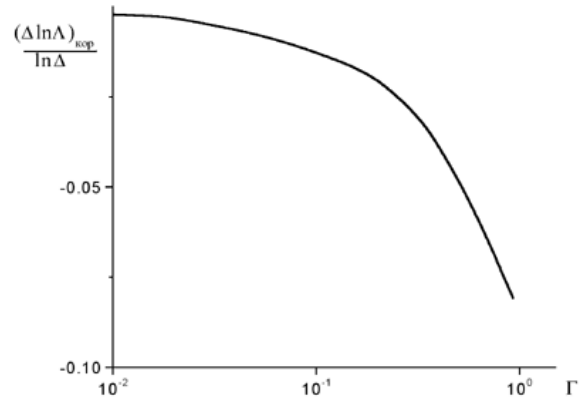


Рис. 12.5: Влияние корреляции ионов на кулоновскую составляющую электропроводности плазмы

$$F(V) = \pi^{-1/2} \sigma_V^{-1} \exp\left(-\frac{V^2}{\sigma_V^2}\right), \quad \sigma_V^2 = 2n_i \int V_{ei}^2(r) dr.$$

Основной вклад в $F(V)$ вносят флуктуации ионов в сфере с радиусом действия g_0 , поэтому условием того, что электрон движется в $V(r)$ как классическая частица, является неравенство

$$\sigma_V \sim \frac{e^2}{r_0} n^{1/2} \gg \frac{\hbar^2}{m_e r_0^2}, \quad \text{где } n_i r_0^3 = 1.$$

В левой части неравенства — глубина типичной потенциальной ямы, в правой — энергия основного состояния электрона относительно дна ямы. Качественно ясно, что существует некоторая энергия E_c , начиная с которой хотя бы один — разрешенный путь пронизывает всю систему рассеивателей, т. е. электроны с $E > E_c$ дают вклад в электропроводность, а с $E < E_c$ — локализованы. Определение E_c и $c(E_c)$ в заданном случайном потенциале — одна из целей ТКП. Другой важной величиной является перколяционная вероятность $P(E)$, определяемая, как условная вероятность того, что точка принадлежит неограниченному пути, если находится в разрешенном пространстве. При $E < E_c$ $P(E) = 0$, $P(E)$ быстро стремится к единице при $E > E_c$, поэтому обычно достаточно считать, что $P(E) = \theta(E - E_c)$. В работе [56] установлено, $c(E_c) = 0,17$ (т.е. $E_c = -0,68\sigma_v$) для $F(V)$ в гауссовой форме и не зависит от вида $v_{ei}(r)$, необходимо лишь, чтобы в сфере действия двухчастичного потенциала находилось достаточно много ионов.

Определим электропроводность плазмы, следуя простым представлениям:

$$\sigma = \frac{2}{3} \frac{e}{m_e} \frac{1}{kT} \exp(\beta\mu_e) \int_{E_c}^E \tau(E) \rho(E) \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) E dE. \quad (12.8)$$

Здесь $\rho(E)$ — одноэлектронная плотность состояний, $\tau(E)$ — время свободного пробега, равное l/v (v — скорость электрона) [73]

$$\tau(E) = \frac{1}{c(E)} \int_{-\infty}^E dV \frac{2}{m_e} (E - V)^{-1/2} \frac{l\lambda}{l + \lambda},$$

l — обычная газокинетическая длина пробега $-l/n_i Q_{mei}(E - V)$, Q_{mei} — может быть рассчитано методом фазовых функций, при этом легко учесть эффект конечного размера ионов, λ описывает рассеяние от краев разрешенных путей, $\lambda \rightarrow \infty$, когда $E \rightarrow \infty$. В работе [73] проведена оценка $\lambda(E)$: $\lambda \sim r_0 c(E) [1 - c(E)]^{-1}$. В условиях, рассматриваемых в данном параграфе, $l \sim \lambda$ при $E < 0$,

Одноэлектронная плотность состояний $\rho(E)$ в квазиклассическом приближении определена следующим образом [73]:

$$\rho(E) = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{\Omega^N} \int [E - V(r)]^{1/2} W(\mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_N) d\mathbf{R}_1 \dots d\mathbf{R}_N.$$

Плотность состояний вычислена при условии $W = 1$ и $n \gg \sqrt{n} \gg 1$ [56]:

$$\rho(E) = \left(\frac{2}{\pi^2}\right)^{1/4} \left(\frac{m_e}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \sigma_V^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{2\sigma_v^2}\right) D_{-3/2}\left(\frac{\sqrt{2}E}{\sigma_v}\right),$$

где $D_{-3/2}(x)$ — функция параболического цилиндра. В работе [27] по модели, аналогичной (12.8), рассчитана электропроводность недебаевской полностью ионизованной плазмы. При этом E_c в (12.8) полагалось равным нулю, не была учтена поправка к длине свободного пробега, связанная с отражением электронов от краев разрешенных областей, тем не менее результаты [27] удовлетворительно согласуются с экспериментальными результатами в области $\Gamma < 0,3$.

Заметим, что для неидеальной плазмы вместо гауссовой функции распределения потенциала и соответствующих ей плотности состояний и величины E_c , в некоторых случаях (когда нарушается условие $n \gg 1$ следует применять функцию распределения Пуассона для $F(V)$ и соответствующим образом измененные $\rho(E)$ и E_c .

В заключение данного параграфа кратко обсудим существующие представления об электронном переносе в парах металлов при закритических давлениях и околоскритических плотностях. Указанная область, назовем ее переходной, характеризуется качественным изменением электронных свойств металлов при варьировании плотности вблизи критической. Экспериментальные исследования переходной области проведены на ртути [28], [94], [111], [6] и цезии [141], [3], [4], [5]. Показано, что в ртути изменение электронных свойств, переход металл—диэлектрик происходит достаточно плавно, а в цезии, вероятно, имеет место переход моттовского типа [105]. Переходная область грубо разделяется по плотности на две, близкие по свойствам металлу, и плазме—газовую область. В работе [105] проведено модельное определение границы раздела этих областей в парах цезия, при этом использовались экспериментальные данные [3], [4], [5]. В газовой области вещество представляет собой плотную плазму. Применение точных подходов для описания ее свойств затруднено, так как взаимодействие между компонентами плазмы является сильным. В газовой области, по-видимому, достигаются минимальные значения проводимости паров металлов на закритической изобаре. Модели [71], [12], [72], по существу, ориентированы на достаточно удаленную от критической точки часть газовой области ($0,1\rho_{кр} < \rho < 0,4\rho_{кр}$) с малой степенью ионизации, где основное влияние на термодинамические свойства плазмы оказывает взаимодействие нейтралов. Взаимодействие заряженных частиц с нейтральными и между собой в этих условиях, не влияя на термодинамические характеристики среды, существенно сдвигает ионизационное равновесие, т. е. сказывается на свойствах электронного переноса в плазме. В моделях [71], [12], [72] разными способами проводится разделение электронов на свободные, т. е. участвующие в транспортном механизме переноса заряда, и локализованные. В работе [71] локализованные электроны описываются «флуктуонами» — образованиями, возникающими вследствие локализации электронов на флуктуациях плотности, в работе [72] локализация интерпретируется в смысле (12.8). Сделать выбор между указанными подходами не удается из-за недостаточности экспериментальных данных.

12.2 Широкодиапазонная модель электронного переноса

В этом разделе представлен обзор вычисления тепло- и электропроводности плазмы в широком диапазоне плотностей и температур по материалам [140]. Описаны методы расчетов, которые использовались для расчетов коэффициентов переноса.

В работе [124] предложен полуэмпирический метод вычисления транспортных коэффициентов в плотной горячей плазме. Эти авторы предложили вычислить рав-

новесную ионизацию в приближении "экранированной водородной модели" [127]. Транспортные коэффициенты в газовой фазе были рассчитаны на основе решения уравнения Больцмана для электронов в τ -приближении. Кулоновские столкновения были учтены в рамках общепринятой модели [90]. Для жидкости и твердого тела применялась модель Займана [169] со структурным фактором в длинноволновом приближении. В этой модели сжимаемость связана с температурой плавления критерием Линдемана. Для сечения рассеяния заряженных частиц использовалось борновское приближение для дебаевского потенциала. Для описания скачка проводимости вблизи точки плавления использовались экспериментальные данные. Зависимость температуры плавления от плотности была оценена из результатов [108].

Метод, предложенный в [124] основан на совместном рассмотрении различных моделей и использовании дополнительных гипотез. Минимальное значение кулоновского логарифма принято равным 2, что основано на численных расчетах [123], а длина пробега электронов ограничена снизу межионным расстоянием r_0 . Из анализа экспериментов [135] следует, что $l > 2r_0$. Модель [124] согласуется с результатами теоретического подхода [146] и [164]. В пределах фактора два модель согласуется с экспериментальными результатами.

Ринкер [142], [143], [144], [151] в серии статей рассмотрел проблему создания широкодиапазонной модели расчета тепло- и электропроводности плазмы. Простейшая модель была предложена в [142], где ионизационное равновесие было рассчитано по модели Томаса-Ферми, в которой для потенциала Томаса-Ферми был использован потенциал типа дебаевского, а сечения рассеяния были рассчитаны в борновском приближении. Межионные корреляции были включены в рамках модели Дебая-Хюккеля. В последующих публикациях [143], [144] Ринкер предложил более сложную модель. Ионизационное равновесие было рассчитано на основе решения системы уравнений Дирака в ячеечной модели. Электронное взаимодействие с экранированным ионом было описано потенциалом, представляющим линейную комбинацию потенциала Томаса-Ферми-Дирака (ТФД) аналогичного потенциалу Дирака-Фока-Слетера (ДФС) для изолированного иона. Весовые коэффициенты были приняты такими, что при $T \gg 100$ эВ и $\rho \gg 100$ г/см³ потенциал совпадает с потенциалом ТФД, а в противоположном пределе - с потенциалом ДФС. Числа заполнения состояний были выбраны соответствующими числу электронов в зоне проводимости, или такими, чтобы получить соответствие величине проводимости в жидкой фазе вблизи точки плавления с точностью не хуже 100%. Дифференциальные сечения рассеяния были вычислены на основе метода фазовых сдвигов. Для межионных корреляций были проанализированы различные методы - модель Дебая-Хюккеля, Перкуса-Иевики для твердых сфер, а также их комбинации. Позже Ринкер [151] решил использовать табличные данные [147] для структурного фактора однокомпонентной плазмы (ОКП). Электропроводность была рассчитана по формулам Займана, а для теплопроводности Ринкер [144] использовал решение уравнения Ленарда-Балеску [80] для частично вырожденной плазмы со слабым взаимодействием частиц, полученное в [121], [122] методом Чепмена-Энскога. Кулоновский логарифм для электрон-электронного рассеяния был рассчитан для дебаевского потенциала в борновском приближении.

В другой серии статей [112], [132], [122], [157], [166], [113] рассматривалась двухкомпонентная электрон-ионная плазма. Авторы развивали теорию корреляций частиц в двухкомпонентной квантовой плазме на основе формализма диэлектрической проницаемости в рамках теории линейного отклика. Для проводимости эти резуль-

таты представляют обобщение формулы Займана на случай отличных от нуля температур. Взаимодействие электронов с ионами было описано потенциалом с динамическим экранированием в борновском приближении. Конкретные вычисления были выполнены для полностью ионизованной водородной плазмы. Параметр ион-ионной неидеальности был ограничен значениями $\Gamma = 2$.

В работе [152] транспортные коэффициенты плазмы вычислены на основе методов функций Грина и линейного отклика (см., например, [97], [117], [151], [152]).

Рассмотрим более подробно модель, положенную далее в основу расчетов электро- и теплопроводности металлов. Электропроводность σ и теплопроводность λ в τ -приближении описывается следующими выражениями (см., например, [124]):

$$\sigma = F_0, \quad \lambda = \frac{1}{kT} \left(F_2 - \frac{F_2^2}{F_0} \right), \quad (12.9)$$

где функции F_k определяются частотами электронных столкновений $\nu(\varepsilon)$:

$$F_k = -\frac{4}{3} \int \frac{\varepsilon^{k+1} \partial f}{\nu(\varepsilon) \partial \varepsilon} \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}. \quad (12.10)$$

Здесь $f(\varepsilon)$ - функция распределения электронов по энергиям ε , зависящая от температуры T и нормированная к концентрации электронов n . Интегрирование в (12.10) выполняется по импульсам электронов $p^2 = 2m\varepsilon$. Конкретные выражения для $\nu(\varepsilon)$ будут приведены ниже. Зависимость частоты столкновений от энергии аналогична кулоновскому рассеянию, предложенному в работе [124]:

$$\sigma = \frac{n}{\nu} A_\sigma \left(\frac{\mu}{kT} \right), \quad \lambda = \frac{nT}{\nu} A_\lambda \left(\frac{\mu}{kT} \right). \quad (12.11)$$

Проводимость σ и теплопроводность λ также выражаются через частоту столкновений ν . В результате, в формулах (12.11) появляются коэффициенты A_σ и A_λ порядка единицы в зависимости от температуры T и химического потенциала электронов μ . Частота электрон-ионных столкновений без учета вырождения ионов выражается через кулоновский логарифм $\ln \Lambda$ и функцию распределения Ферми-Дирака:

$$\nu_0 = \frac{2^{3/2} \pi Z_i^2 n_i \ln \Lambda}{3T^{3/2}} \frac{I_{1/2}^{-1}(\mu/kT)}{1 + \exp(\mu/kT)}, \quad (12.12)$$

где Z_i - средний заряд иона, n_i - концентрация ионов, а коэффициенты A_σ и A_λ имеют вид:

$$A_\sigma = \frac{4}{3} \frac{I_3}{\left[1 + \exp(\mu/kT) I_{1/2}^2 \right]}, \quad A_\lambda = \frac{20}{9} \frac{1 - 16I_3^2/15I_2I_4}{1 + \exp(\mu/kT) I_{1/2}^2}, \quad (12.13)$$

где функции Ферми-Дирака I_α содержат отношение μ/kT как аргумент. В предельном случае Больцмановской статистики получается:

$$\nu_0 = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \frac{Z_i^2 n_i \ln \Lambda}{T^{3/2}}, \quad A_\sigma = \frac{32}{3\pi}, \quad A_\lambda = \frac{128}{3\pi}, \quad (12.14)$$

а для случая полностью ионизованной вырожденной электронной плазмы (ε_F - энергия Ферми):

$$\nu_0 = \frac{\pi\sqrt{2}Z_i^2 n_i \ln \Lambda}{\varepsilon_F^{3/2}}, \quad A_\sigma = 1, \quad A_\lambda = \frac{\pi^2}{3}. \quad (12.15)$$

Поскольку в выражении ε_q (12.12) кулоновский логарифм $\ln \Lambda$ рассматривался как функция, слабо зависящая от энергии, естественно использовать вместо (12.13) следующие упрощенные приближения

$$\nu_0 = \frac{\pi \sqrt{2} Z_i^2 n_i \ln \Lambda(\varepsilon_{eff})}{\varepsilon_{eff}^{3/2}}, \quad (12.16)$$

$$A_\sigma = \frac{32}{3\pi} \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_F}{\varepsilon_{eff}} + \frac{\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_{eff} - 3kT/2}{\varepsilon_{eff}}, \quad A_\lambda = \frac{128}{3\pi} \frac{\varepsilon_{eff} - \varepsilon_F}{\varepsilon_{eff}} + \frac{\pi^2}{3} \frac{\varepsilon_{eff} - 3kT/2}{\varepsilon_{eff}},$$

где эффективная энергия ε_{eff} определяется как $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_F + 3kT/2$.

Строго говоря, в этих формулах не учитываются электрон-электронные столкновения. Для сильно ионизованной плазмы ($Z_i > 1$) это приближение справедливо, потому что электрон-ионное сечение в Z_i^2 больше чем электрон-электронное сечение рассеяния. Кроме того, с ростом вырождения вклад электрон-электронного рассеяния уменьшается вследствие принципа Паули. Формулы, учитывающие электрон-электронное рассеяние для невырожденной плазмы были получены в Спитцером и Хэрмом [155] для $Z = 1$. В результате, выражения Лоренца для коэффициентов переноса плазмы следует изменить следующим способом: $\sigma \rightarrow \gamma_\sigma(Z_i)\sigma$, $\lambda \rightarrow \gamma_\lambda(Z_i)\lambda$, где $\gamma_\sigma(1) = 0.582$, $\gamma_\lambda(1) = 0.236$. Значения коэффициентов γ_σ и γ_λ для $Z_i > 1$ были получены Спитцером в [156]. В работе [136] были исследованы общие случаи и для γ_σ и получено

$$\gamma_\sigma(Z_i) = \frac{3\pi}{32} \left(1 + \frac{153Z_i^2 + 509Z_i}{64Z_i^2 + 345Z_i + 288} \right). \quad (12.17)$$

Для промежуточного случая промежуточного вырождения Беспалов и Полищук [82] предложили следующую интерполяционную формулу:

$$\gamma \rightarrow \gamma + (1 - \gamma) \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_F + 3kT/2}, \quad (12.18)$$

обеспечивающую $\gamma \rightarrow 1$ в пределе $\varepsilon_F/kT \rightarrow \infty$. Из уравнения (12.17) следует, что при $\gamma \rightarrow 1$ $Z_i \rightarrow \infty$. Для применения этих формул, необходимо выражение для частоты столкновений электронов с ионами $\nu(\varepsilon)$. С одной стороны, оно определяется параметрами ионизационного равновесия в плазме, с другой - определяется кулоновскими столкновениями. Кулоновский логарифм определяет транспортное сечение рассеяния электрона на ионе:

$$Q_m = \frac{\pi Z_i^2}{\varepsilon^2} \ln \Lambda(\varepsilon). \quad (12.19)$$

Здесь ε - энергия относительного движения электрона и иона. Вследствие дальнего действующего характера кулоновского потенциала транспортное сечение рассеяния расходится логарифмически на малых расстояниях. Влияние среды на парном рассеянии проявляется в ограничении на больших расстояниях, что приводит к конечному выражению для кулоновского логарифма $\ln \Lambda(\varepsilon)$. Взаимодействие между ионами и электронами в слабо неидеальной плазме может быть описано дебаевским экранированным потенциалом:

$$U(r) = -\frac{Z_i}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_D}\right), \quad (12.20)$$

где r_D - дебаевский радиус экранирования. Для вычисления термодинамических функций нужно использовать выражение для r_D , включающее вклады электронов и ионов. Для транспортных процессов, повидимому, ионы, имея гораздо большую массу чем электроны, дают меньший вклад в экранирование. Для приближенного учета экранирования, далее r_D будет рассматриваться как электронный дебаевский радиус. Для случая произвольного вырождения он может быть выражен следующим образом:

$$\frac{1}{r_D^2} = \frac{2\pi n}{kT} \frac{I_{-1/2}(\mu/kT)}{I_{1/2}(\mu/kT)} \quad (12.21)$$

где n - концентрация электронов, T - температура, μ - химический потенциал, I_α - функция Ферми-Дирака порядка α . В вырожденном электронном газе ($\mu/kT \rightarrow \infty$) получается асимптотическое выражение

$$\frac{1}{r_D^2} = \frac{4\pi n}{kT} \frac{3kT}{2\varepsilon_F} = 4 \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{1/3}. \quad (12.22)$$

В противоположном случае бoльцмановской статистики ($\mu/kT \rightarrow -\infty$) получаем

$$\frac{1}{r_D^2} = \frac{4\pi n}{kT}. \quad (12.23)$$

Оба случая могут быть объединены следующей простой формулой

$$\frac{1}{r_D^2} = \frac{4\pi n}{kT} \frac{1}{[1 + (2\alpha/3)^2]^{1/2}}, \quad (12.24)$$

где $\alpha = \varepsilon_F/T$ - параметр вырождения. Уравнение (12.24) воспроизводит точный результат с точностью до нескольких процентов. Однако, применимость уравнения (12.20) ограничена случаем слабой неидеальности, т.е. такими концентрациями, при которых $r_D \gg r_e$, где r_e - среднее расстояние между электронами. Очевидно, что эффективный радиус кулоновский потенциала (радиус экранирования) не может быть меньше чем среднее электронное расстояние, поэтому, в сильно неидеальной плазме в уравнении (12.20) должна быть сделана замена $r_D \rightarrow r_e$, что и будет использовано ниже в выражении для транспортного сечения рассеяния.

Теперь рассмотрим выражение для эффективного транспортного сечения рассеяния электрона с энергией ε на ионе в неидеальной плазме. При $Z_i \varepsilon^{-1/2} \ll 1$ справедливо борновское приближение, откуда следует выражение для кулоновского логарифма в квантовом случае:

$$\ln \Lambda_q = \frac{1}{2} \left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{r_D}{\lambda} \right)^2 \right] - \frac{r_D^2}{r_D^2 + \lambda^2} \right\}, \quad (12.25)$$

где $\lambda = \hbar(8\varepsilon)^{-1/2}$ - электронная длина волны Де-Бройля. Кулоновский логарифм зависит от безразмерного параметра r_D/λ . Легко видеть, интерполяционная формула, точная в обоих предельных случаях $r_D/\lambda \ll 1$ и $r_D/\lambda \gg 1$ имеет вид:

$$\ln \Lambda_q = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{r_D}{\lambda} \right)^4 \right]. \quad (12.26)$$

В промежуточных случаях эта формула описывает точный результат с точностью не хуже 10%.

Такая форма представления удобна для широкодиапазонного выражения для кулоновского логарифма и для фактора Гаунта, определяющего излучение в плазме. В обратном предельном случае $Z_i \varepsilon^{-1/2} \gg 1$ реализуется классический механизм рассеяния. В этом случае кулоновский логарифм зависит от другого безразмерного параметра r_D/l , где $l = Z_i/8\varepsilon$ - характерное расстояние между ионом и электроном с энергией ε . При $r_D/l \gg 1$ выражение для кулоновский логарифма известно:

$$\ln \Lambda_C = \ln \frac{r_D}{l}. \quad (12.27)$$

Уравнение (12.27) написано с логарифмической точностью, достаточной для больших значений аргумента. Конкретный выбор численного коэффициента в выражении для l связан со способом получения объединенного выражения, описывающего и динамическую и статическую проводимости [139], [140]. Когда далекие классические столкновения не важны ($r_D/l \ll 1$), характеристическое сечение рассеяния должно иметь порядок квадрата "геометрического размера иона" (Z_i/ε). Как следует из уравнения (12.19), это соответствует $\ln \Lambda_C \approx 1$. Точное вычисление транспортного сечения рассеяния [123] подтверждает это качественное заключение. Таким образом, объединенная формула для классического кулоновского логарифма, согласованного с уравнением (12.26), имеет вид:

$$\ln \Lambda_C = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{r_D + l}{l} \right)^4 \right]. \quad (12.28)$$

Уравнения (12.26) и (12.28) могут быть объединены в общее выражение для описания столкновений в промежуточном диапазоне параметров [?]:

$$\ln \Lambda_C = \frac{1}{4} \ln \left[1 + \left(\frac{r_D + a + e^2/(l + \lambda)}{l + \lambda} \right)^4 \right] \quad (12.29)$$

Несмотря на простоту, уравнение (12.29) включает описание наиболее важных эффектов. Как будет показано ниже, оно позволяет с удовлетворительной точностью описать множество экспериментальных результатов в плотной плазме произвольного вырождения. Полищук [140] показал что уравнение (12.29) дает возможным получить объединенное описание статической и динамической электропроводности сильно неидеальной плазмы. Транспортное сечение рассеяния (12.19) с кулоновским логарифмом (12.29) определяет кинетические коэффициенты с частотой столкновений $\nu_0(\varepsilon) = n_i v Q_m(\varepsilon)$ электронов с ионами, где скорость электронов равна $v = (2\varepsilon^{1/2}/m)$, n_i - концентрация ионов. Строго говоря, в эффективной частоте столкновений в плотной плазме должна быть принята во внимание интерференция волн, рассеянных от различных силовых центров. Очевидно, в этом случае результат должен зависеть от структурных свойств рассеивателей:

$$\nu(\varepsilon) = n_i v \int S(\Delta p) r_D dQ_m(\Delta p), \quad (12.30)$$

где Δp - переданный импульс, $Q_m(\Delta p)$ - дифференциальное транспортное сечение рассеяния, $S(\Delta p)$ - структурный фактор ионов в импульсном представлении как функция переданного импульса. Эта формула была предложена Займаном [169] в

теории электропроводности жидких металлов. Рассеяние с малыми передачами импульса Δp преобладает в выражении (12.30) для кулоновского взаимодействия, поэтому, для оценки этого интеграла можно приблизительно заменить $S(\Delta p) \rightarrow S(0)$ и получить выражение

$$\nu(\varepsilon) = n_i v Q_m(\varepsilon) S(0) = \nu_0 S(0). \quad (12.31)$$

Структурный фактор при нулевой передаче импульса $S(0)$ непосредственно связан с изотермической сжимаемостью χ_T : $S(0) = n_i T \chi_T$. Для кристаллов Займан [170] предложил формулу, связывающую структурный фактор $S(0)$ с температурой плавления T_m :

$$S(0) = \frac{T}{37T_m}. \quad (12.32)$$

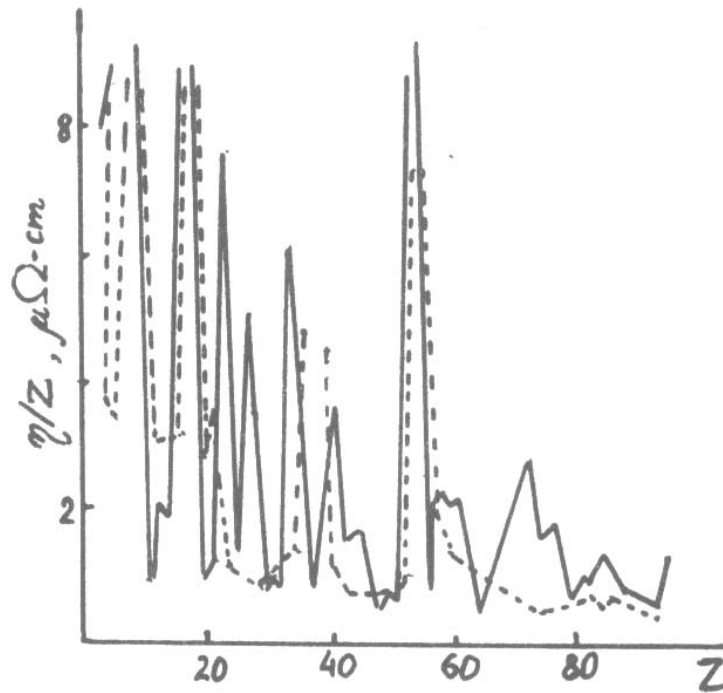


Рис. 12.6: Приведенное сопротивление для элементов таблицы Менделеева в нормальном состоянии. Z - заряд ядра. Сплошные линии - экспериментальные данные [165], [89], пунктирные линии - широкодиапазонная модель [82].

Имея в виду умеренные требования к точности для модели широкого диапазона, можно пренебречь различием между сжимаемостью твердого тела и жидкости в точке плавления (с точностью до коэффициента порядка 2) и принять во внимание, что изотермическая сжимаемость имеет тенденцию к $(n_i T)^{-1}$ при высоких температурах. На этом основании в [139] предложена следующая интерполяционная формула:

$$S(0) = \frac{T}{37T_m + T}, \quad (12.33)$$

описывающая газообразный предел $S(0) \rightarrow 1$ при $T \gg T_m$. Кроме того, принимая во внимание зависимость температуры плавления T_m от плотности в рамках ОКП

Элемент	$\eta_{\text{эсп}}$	η_R	η	Элемент	$\eta_{\text{эсп}}$	η_R	η
<i>Li</i>	24	109	39	<i>Rb</i>	22	∞	114
<i>Be</i>	45	25	15	<i>Sr</i>	58	∞	78
<i>B</i>	210	34	13	<i>Zr</i>	153	10^4	32
<i>Na</i>	10	∞	65	<i>Nb</i>	105	964	29
<i>Mg</i>	27	672	36	<i>Mo</i>	61	468	22
<i>Al</i>	24	137	27	<i>Ag</i>	17	423	26
<i>Si</i>	80	234	27	<i>Cd</i>	34	994	33
<i>S</i>	∞	1387	41	<i>In</i>	33	10^4	41
<i>Ca</i>	25	∞	64	<i>Sn</i>	48	10^4	42
<i>Ti</i>	172	415	27	<i>Sb</i>	114	∞	46
<i>V</i>	71	146	22	<i>Te</i>	550	∞	52
<i>Cr</i>	32	119	19	<i>Cs</i>	37	∞	150
<i>Mn</i>	40	92	20	<i>Ba</i>	135	∞	93
<i>Fe</i>	139	85	20	<i>La</i>	138	∞	56
<i>Co</i>	102	74	19	<i>Ta</i>	118	1000	24
<i>Ni</i>	85	69	19	<i>W</i>	127	1000	21
<i>Cu</i>	21	68	20	<i>Pt</i>	73	541	21
<i>Zn</i>	37	80	26	<i>Au</i>	31	709	24
<i>G</i>	26	65	29	<i>Hg</i>	91	1000	37
<i>Ge</i>	67	688	30	<i>Pb</i>	95	∞	45
<i>As</i>	210	10^4	28	<i>Bi</i>	128	∞	26
<i>Se</i>	10^8	10^8	36	<i>U</i>	64	1000	30

Таблица 12.1: Сопротивление (10^{-6} Ом*см) жидкостей вблизи точки плавления. Экспериментальные значения $\eta_{\text{эсп}}$ из [100], вычисления - η_R по [151], η [?].

для ионов с зарядом Z_i [147], получается $T_m = Z_i^2/170R_0$, где R_0 - радиус ячейки Вигнера-Зейтца. В этой формуле введен поправочный фактор, равный отношению экспериментальных и расчетных значений температуры плавления при нормальной плотности.

Электропроводность неидеальной классической ударно сжатой плазмы благородных газов была исследована экспериментально в работах [23] и [68]. В таблице 12.4 представлено сравнение экспериментальных результатов [23] с вычислениями от модели WRTGCM. В таблице 12.5 подобное сравнение приведено с экспериментальными данными [68].

В представленном широкодиапазонном методе вычисления электро- и теплопроводности плазмы, используются данные по ионизационным состояниям, т.е. средним зарядам тяжелых частиц и концентрациям свободных электронов. При включении ионизационного состояния в рамках "обобщенной химической модели" для расчетов ионизационного равновесия этот метод составляет так называемую модель WRTGCM, которая позволяет вычислять электронные транспортные коэффициенты в любой точке фазовой диаграммы.

В приложении приведены таблицы, включающие данные равновесия ионизации, тепло- и электропроводности плазмы алюминия, железа, меди, золота, свинца, висмута и урана. Данные рассчитаны по модели WRTGCM для широкого диапазона температур и плотностей.

Погрешности численных данных могут быть оценены из сравнения расчетных и экспериментальных результатов в различных областях фазовых диаграмм. В таблице 12.1 включены удельные сопротивления нескольких элементов в жидкой фазе в

Элемент	$\lambda_{\text{ЭКСП}}$	$\lambda_{\text{ВЫЧ}}$	Элемент	$\lambda_{\text{ЭКСП}}$	$\lambda_{\text{ВЫЧ}}$
<i>Li</i>	71	29	<i>Rb</i>	36	6
<i>Be</i>	179	249	<i>Sr</i>		31
<i>B</i>	26	422	<i>Zr</i>	30	151
<i>Na</i>	150	14	<i>Nb</i>	53	249
<i>Mg</i>	173	62	<i>Mo</i>	138	298
<i>Al</i>	222	91	<i>Ag</i>	453	113
<i>Si</i>	152	151	<i>Cd</i>	93	43
<i>S</i>	0.2	26	<i>In</i>	80	26
<i>Ca</i>	98	40	<i>Sn</i>	60	29
<i>Ti</i>	22	162	<i>Sb</i>	19	46
<i>V</i>	31	233	<i>Te</i>	32	33
<i>Cr</i>	89	262	<i>Cs</i>	0.02	4
<i>Mn</i>	157	179	<i>Ba</i>		25
<i>Fe</i>	76	216	<i>La</i>	21	49
<i>Co</i>	70	224	<i>Ta</i>	45	309
<i>Ni</i>	67	220	<i>W</i>	154	390
<i>Cu</i>	401	160	<i>Pt</i>	74	223
<i>Zn</i>	112	66	<i>Au</i>	310	130
<i>Ga</i>	29	26	<i>Hg</i>	8	16
<i>Ge</i>	61	98	<i>Pb</i>	36	33
<i>As</i>		94	<i>Bi</i>	8	51
<i>Se</i>	0.8	33	<i>U</i>	27	110

Таблица 12.2: Теплопроводность λ (Вт/м * К) твердых тел при температуре 300 К. Экспериментальные данные [89], расчетные - [82].

	T(K)	ρ (г/см ³)	$\sigma_{\text{ЭКСП}}$ (1/Ом * см)	$\sigma_{\text{ВЫЧ}}$ ((1/Ом * см))
<i>Сн</i>	1356	8.00	$5.21 \cdot 10^4$	$4.5 \cdot 10^4$
	2000	7.52	$4.40 \cdot 10^4$	$2.9 \cdot 10^4$
	2500	7.09	$3.86 \cdot 10^4$	$2.2 \cdot 10^4$
	3000	6.76	$3.43 \cdot 10^4$	$1.8 \cdot 10^4$
<i>Al</i>	3500	6.42	$3.09 \cdot 10^4$	$1.5 \cdot 10^4$
	933	2.42	$3.83 \cdot 10^4$	$3.7 \cdot 10^4$
	1500	2.29	$3.02 \cdot 10^4$	$2.3 \cdot 10^4$
	2000	2.18	$2.50 \cdot 10^4$	$1.7 \cdot 10^4$
	2500	2.08	$2.10 \cdot 10^4$	$1.3 \cdot 10^4$
	3500	1.82	$1.54 \cdot 10^4$	$0.9 \cdot 10^4$
	4000	1.78	$1.33 \cdot 10^4$	$0.8 \cdot 10^4$

Таблица 12.3: Сравнение вычисленных и экспериментальных [103] значений электропроводности расширенных алюминия и меди.

	$T(10^3 K)$	$\rho(\text{мг/см}^3)$	$\sigma_{\text{эксп}}(1/\text{Ом} * \text{см})$	$\sigma_{\text{выч}}(1/\text{Ом} * \text{см})$
Xe	30.1	63	450	441
	27.5	170	680	491
	27.0	260	740	520
	26.1	489	690	607
	25.1	390	780	622
	24.6	970	1040	661
Ar	22.7	1300	930	630
	22.2	3.9	190	216
	20.3	13	155	217
	19.3	32	170	222
	19.0	96	255	244
	17.8	172	245	243
Ne	19.8	11	130	165
	19.6	36	165	179

Таблица 12.4: Сравнение расчетных и экспериментальных данных [?] по электропроводности плазмы неидеальных благородных газов (ксенон, аргон, неон).

$T(10^3 K)$	$\rho(\text{мг/см}^3)$	$\sigma_{\text{эксп}}(1/\text{Ом} * \text{см})$	$\sigma_{\text{выч}}(1/\text{Ом} * \text{см})$
29	1510	680	1027
37	1500	730	1321
44	900	970	1297
59	590	1300	1465
76	240	1100	1422
50	575	830	1249
64	293	750	1271
70	150	700	1174
62	150	670	1042
65	103	620	996
95	47	550	1163
70	55	700	913
47	55	470	610

Таблица 12.5: Сравнение расчетных и экспериментальных данных [68] по электропроводности неидеальной плазмы ксенона.

их точках плавления, которые были получены экспериментально [165], [89], вычисленные по модели WRTGCM, а также данные [142]. На рис.12.6 приведено сравнение экспериментальных данных и расчетов [83]. Аналогичное сравнение для теплопроводности выполнено в таблице 12.2. Электропроводность в области расширения металлов была измерена посредством взрыва проводников [103]. Сравнение этих результатов с результатами модели WRTGCM представлено в табл. 12.3. Сравнение, представленное в таблицах 12.1, 12.2 и 12.3 с экспериментальными данными подтверждает удовлетворительную точность модели WRTGCM для вычисления электро- и теплопроводности вырожденной сильно неидеальной плазмы в металлической конденсированной фазе.

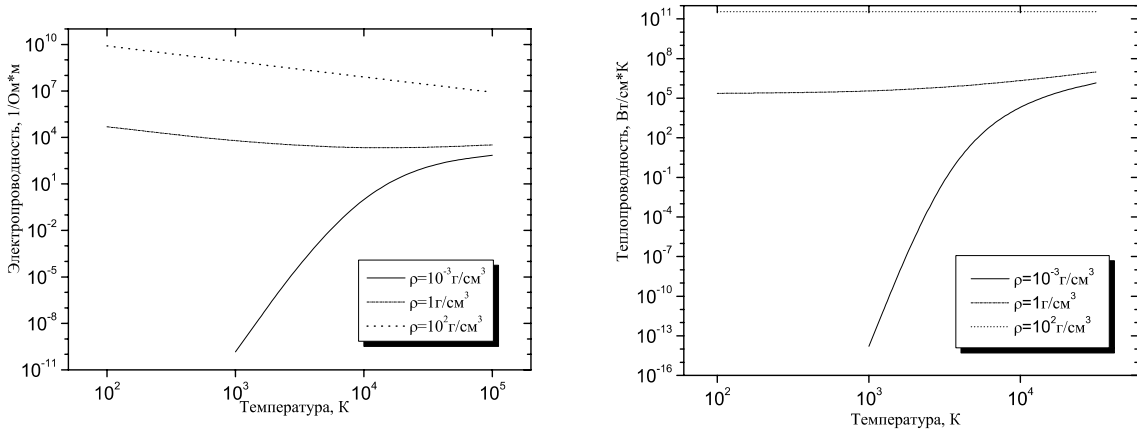


Рис. 12.7: Электропроводность и теплопроводность алюминия

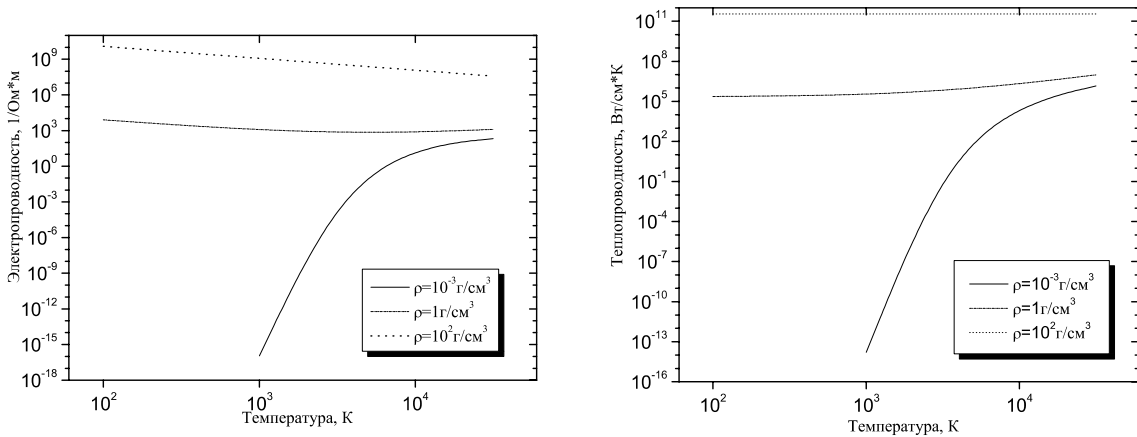


Рис. 12.8: Электропроводность и теплопроводность железа

На рис. 12.7, 12.8, ??, 12.9, 12.10, 12.11, приведены электропроводность и теплопроводность алюминия, железа, висмута, свинца и урана в широком диапазоне параметров в газообразном, жидком и твердом состояниях.

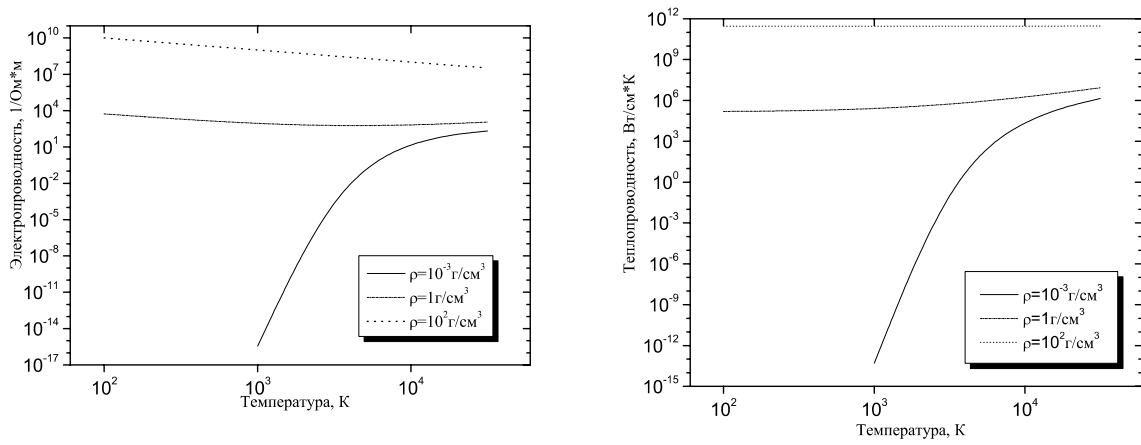


Рис. 12.9: Электропроводность и теплопроводность меди

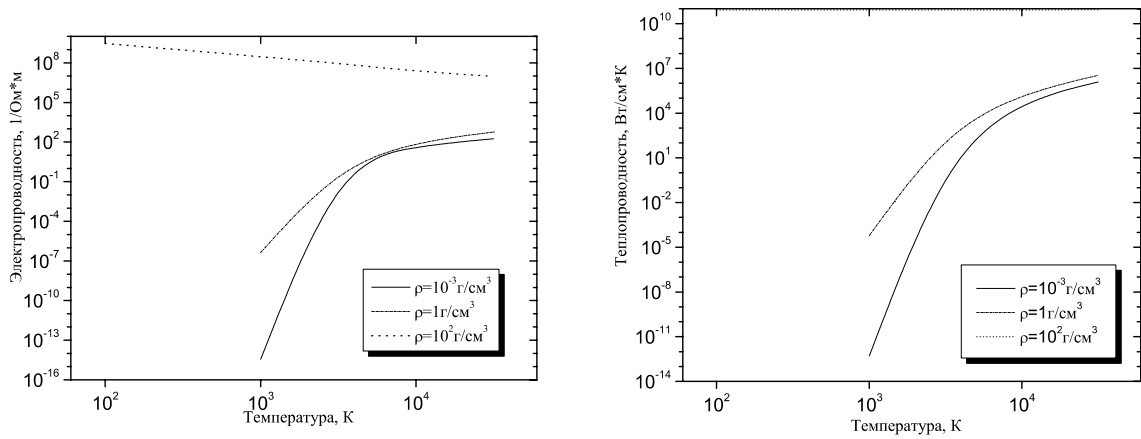


Рис. 12.10: Электропроводность и теплопроводность свинца

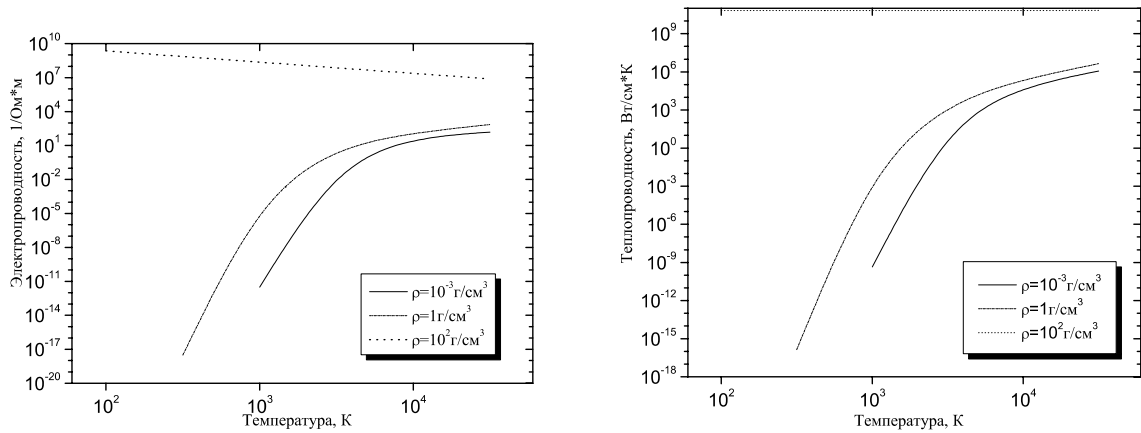


Рис. 12.11: Электропроводность и теплопроводность урана

Глава 13

Транспортные свойства многокомпонентной плазмы

13.1 Явления переноса в реагирующих газовых смесях

В низкотемпературной плазме большая доля частиц имеет энергии, превышающие пороги химических реакций, поэтому в кинетических уравнениях и при вычислении коэффициентов переноса следует учесть внутренние степени свободы частиц и связанной с ними перенос внутренней энергии частиц. Гидродинамическое описание системы характеризуется тем, что пространственно-временное изменение параметров определяется лишь первыми пятью моментами функций распределения частиц - концентрациями компонентов n_i , гидродинамической скоростью \mathbf{v}_0 и температурой T . Для возможности гидродинамического описания системы необходимо, чтобы эти макроскопические параметры изменялись медленно по сравнению с процессами формирования равновесия между отдельными компонентами газовой смеси. В атомарном газе равновесная, максвелловская функция распределения устанавливается за малые времена, порядка нескольких времен свободного пробега частиц. Если это время меньше времени пребывания частиц в объеме порядка размера неоднородности, то максвелловской функции распределения можно приписать локальную температуру $T(\mathbf{r})$. Многоатомные молекулы имеют поступательные, вращательные, колебательные и электронные степени свободы. Если для установления равновесия по поступательным степеням свободы требуется несколько столкновений, то по вращательным - порядка 10^2 , а для равновесия между поступательными и вращательными степенями свободы $\sim 10^5$. Скорость обмена энергией между колебательными степенями свободы достаточно велика, поэтому в неравновесном газе часто можно ввести отдельно температуру поступательных и вращательных степеней свободы и температуру колебательного распределения молекул. В этом случае вместо одного уравнения энергии следует писать отдельно баланс энергии для поступательно-вращательных и колебательных степеней свободы с учетом члена, определяющего обмен энергией между этими подсистемами. В других случаях возможны другие способы разделения газовой смеси на подсистемы. Во всех случаях гидродинамическое описание справедливо, если можно выделить "быстрые" и "медленные" подсистемы. К первым относятся те типы столкновений, которые приводят распределение частиц к квазиравновесному виду, ко вторым - остальные типы столкновений, гидродинамическое

течение, взаимодействие с самосогласованным полем, и другие процессы, которые возмущают локальное квазиравновесное распределение. Параметры, описывающие квазиравновесное распределение, являются удобными гидродинамическими переменными. Если быстрые и медленные процессы не разделяются, использование гидродинамических уравнений невозможно. Рассмотрим неравновесную газовую смесь и определим концентрации компонентов, плотность газа, среднемассовую скорость и удельную энергию через неравновесные функции распределения частиц $f_{in}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, индексы указывают сорт частиц (компонент), n, m - квантовые состояния частицы сорта i :

$$\begin{aligned} n_i(\mathbf{r}, t) &= \sum_n \int f_{in}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d\mathbf{v}, \\ \rho(\mathbf{r}, t) &= \sum_i m_i n_i(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{v}_0(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\rho} \sum_{i,n} m_i \int f_{in} \mathbf{v} d\mathbf{v}, \\ u(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\rho} \sum_{i,n} \int f_{in} \left[\frac{1}{2} m_i (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2 + E_{in} \right] d^3v. \end{aligned}$$

Здесь E_{in} - энергия частицы сорта i в квантовом состоянии n . Начало отсчета энергии берется общим для всех компонентов, например, энергии не ионизованных атомов считаются равными нулю.

При описании плазмы, основываясь на представлениях химической модели, различают следующие характерные времена: τ_y - время между упругими столкновениями частиц плазмы, τ_{ny} - характерное время между неупругими столкновениями, сопровождающимися процессами возбуждения и тушения атомных и молекулярных состояний, химическими реакциями и другими процессами, связанными с перестройкой внутренних состояний частиц, τ - время макропроцессов (диффузии компонентов плазмы и т.п.). В приближении $\tau \gg \tau_y, \tau_{ny}$, называемом ниже приближением локального термодинамического равновесия (ЛТР), достаточно быстро по сравнению с временами макропроцессов устанавливаются равновесные распределения частиц по скоростям и энергиям, химическое равновесие при данных температуре, концентрациях химических элементов и давлении в каждой точке объема, занимаемого плазмой. Если условие $\tau \gg \tau_y, \tau_{ny}, \tau_x$, выполняется в процессе работы устройства, приближение ЛТР естественно использовать для исследования газодинамических процессов. Приведем гидродинамическую систему уравнений, описывающую движение многоэлементной ионизованной однофазной среды при наличии электромагнитных полей и поля излучения в ЛТР:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (13.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial c_\alpha}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla c_\alpha \right) = -\nabla \cdot \mathbf{i}_\alpha, \quad (13.2)$$

$$\frac{\partial \rho_e^*}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_e^* \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{j}, \quad (13.3)$$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \Pi + \frac{1}{c} \mathbf{j} \times \mathbf{H}, \quad (13.4)$$

$$\rho \left(\frac{\partial h}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla h \right) = \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{v} \nabla p + \Pi : \nabla \mathbf{v} - \nabla \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_R) + \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}. \quad (13.5)$$

Здесь (13.1) - уравнение непрерывности, ρ - плотность плазмы, \mathbf{v} - среднемассовая скорость, (13.2)- уравнения диффузии химических элементов, число которых равно $N_\alpha - 1$, где N_α - число химических элементов, образующих плазму, c_α -массовая концентрация химического элемента, i_α - массовый поток химического элемента:

$$c_\alpha = \sum_{i=1}^N \frac{c_i u_{ia} m_\alpha}{m_i}, \quad \mathbf{i}_\alpha = \sum_{i=k}^N \frac{\mathbf{i}_k u_{ka} m_\alpha}{m_k}, \quad (13.6)$$

где $u_{k\alpha}$ - количество ядер элемента α в компоненте k , m_k, m_α - массы частицы компонента k и элемента α , $c_i = n_i m_i / \rho$, где n_i - концентрация i - го компонента, N - число компонентов в плазме, i_k - массовый поток компонента k , (13.3)-уравнение неразрывности для заряда, j - электрический ток, ρ_e^* - объемная плотность электрического заряда, (13.4)-уравнение движения среды, Π - тензор вязких напряжений, p -давление, $\mathbf{E}^* = \mathbf{E} + (1/c)\mathbf{v} \times \mathbf{H}$, \mathbf{E} , \mathbf{H} - электрическое и магнитное поля в лабораторной системе координат. Уравнение (13.5) -уравнение баланса энергии, $h(p, T, c_\alpha, \rho_e^*)$ - удельная энтальпия плазмы, \mathbf{q} -конвективный тепловой поток, \mathbf{q}_R - поток энергии излучения. Система уравнений (13.1)-(13.5) должна быть дополнена уравнениями Максвелла, определяющими поля в плазме, уравнением переноса излучения, уравнением состояния плазмы и системой уравнений для термодинамических функций плазмы в зависимости от $p, T, \{c_\alpha\}, \tilde{z}$, выражения для $\mathbf{i}_\alpha, \mathbf{q}, \mathbf{j}$ через градиенты $p, T, \{c_\alpha\}, \tilde{z}$ и \mathbf{E}, \mathbf{H} , определением Π . Уравнения Максвелла, определяющие поля в плазме, следует применять в магнитогидродинамическом приближении, в котором пренебрегается током смещения и силой, связанной с объемным зарядом. В этом приближении система уравнений Максвелла сводится к уравнению магнитной индукции $\partial \mathbf{H} / \partial t = -\text{rot} \mathbf{E}$, где электрическое поле \mathbf{E} выражается из закона Ома (13.10), в котором полагается $\mathbf{j} = (c/4\pi)\text{rot} \mathbf{H}$. Таким образом, получаем замкнутое уравнение для магнитного поля \mathbf{H} , после решения которого определяется плотность тока и электрическое поле, уравнение (13.3) при этом оказывается излишним.

Выражения для потоков тепла, массы химического элемента, импульса и заряда в ЛТР имеют вид [24],[49],[33]:

$$\mathbf{q} = -(\lambda' - \lambda^T) \nabla T + \sum_{a=1}^{N_\alpha-1} \lambda_a \nabla c_a - \lambda^E \mathbf{E}^*, \quad (13.7)$$

$$\mathbf{i}_\alpha = \sum_{b=1}^{N_\alpha-1} D_{ab} \nabla c_b + D_\alpha^T \nabla T - D_\alpha^E \mathbf{E}^*, \quad (13.8)$$

$$\Pi_{ij} = -\eta \left[\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \frac{\delta_{ij} \partial v_k}{\partial x_k} \right] - \frac{\zeta \delta_{ij} \partial v_l}{\partial x_l}, \quad (13.9)$$

$$\mathbf{j} \simeq \mathbf{l}_e = \sigma [\mathbf{E}^* - \nabla_T \mu_e / e] + \alpha \nabla T. \quad (13.10)$$

Приближенное равенство (13.10) отражает тот факт, что в плазме в условиях, реализующихся в ГЯР, перенос заряда производится в основном электронами. В выражениях (13.7) - (13.10) λ' - коэффициент транспортной теплопроводности, $\lambda^T, \lambda_\alpha, \lambda^E$ - эффективные коэффициенты теплопроводности, $D_{ab}, D_\alpha^T, D_\alpha^E$ - эффективные коэффициенты диффузии, η, ζ - коэффициенты сдвиговой объемной вязкости, σ, α -

проводимость и термо-э.д.с. плазмы. Отметим, что в частном случае равенства нулю массовых потоков химических элементов и электрического тока в среде, эффективные коэффициенты теплопроводности следует заменить одним эффективным коэффициентом - λ_x , и выражение для \mathbf{q} сведется к виду

$$\mathbf{q} = -(\lambda' + \lambda_x) \nabla T \quad (13.11)$$

При этом \mathbf{q} и λ_x не зависят от уровня отсчета энергии, в то время как эффективные коэффициенты теплопроводности и тепловой поток в форме (13.7) - зависят. Левая часть уравнения сохранения энергии в указанном частном случае также инвариантна относительно уровня отсчета энергии, так как в левой части выражения (13.5) выпадают слагаемые, пропорциональные $(\partial h / \partial c_\alpha)$ и $(\partial h / \partial \tilde{z})$ [33], [91].

Для кинетического описания неравновесной газовой смеси необходимо получить кинетические уравнения для функций распределения f_{in} , учитывающих внутренние степени свободы частиц. Эти уравнения отличаются от обычного уравнения Больцмана дополнительным интегралом столкновений, учитывающим неупругие столкновения частиц (St_{in}^{ny})

$$\frac{\partial f_{in}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f_{in} + \frac{\mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t)}{m_i} \frac{\partial f_{in}}{\partial \mathbf{v}} = St_{in}^y + St_{in}^{ny}. \quad (13.12)$$

Здесь $f_{in} = f_{in}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, St_{in}^y - обычный интеграл упругих столкновений, но для частиц в квантовом состоянии n . Для неупругого столкновения, сопровождающегося реакцией

$$A_i(n) + A_k(m) \rightleftharpoons A_l(n') + A_s(m'), \quad (13.13)$$

интеграл неупругих столкновений имеет вид

$$St_{in}^{ny} = \sum_{km, ln', sm'} \int (f_{ln'} f_{sm'} - f_{in} f_{km}) |\mathbf{v}_{in} - \mathbf{v}_{km}| dQ_{in, km}^{ln', sm'} d^3 v_{km}.$$

Здесь $dQ_{in, km}^{ln', sm'}$ - дифференциальное сечение реакции (13.13). Интегралы столкновений по порядку величины равны $St_{in}^y \sim \nu_y f_{in}$, $St_{in}^{ny} \sim \nu_{ny} f_{in}$. Частоты упругих столкновений ν_y обычно превышают частоты неупругих столкновений по двум причинам - во-первых, сечения упругих столкновений обычно более чем на порядок больше сечений неупругих столкновений, во-вторых, частоты неупругих столкновений определяются значением функции распределения частиц при пороговых энергиях неупругого процесса. Соотношение частоты столкновений $\nu_y \gg \nu_{ny}$ приводит к тому, что упругие столкновения приводят к установлению максвелловской функции распределения, с медленно меняющимися параметрами (концентрацией частиц и др.), определяющимися неупругими столкновениями. В уравнении (13.12) $\mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t)$ - сила, действующая на частицу сорта i , эта сила определяется для заряженных частиц самосогласованным и внешним \mathbf{E}_0 полями

$$\mathbf{F}_i(\mathbf{r}, t) = Z_i e \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = Z_i e \left(\mathbf{E}_0 + \sum_{k, m} \int \frac{Z_n l}{\mathbf{r} - \mathbf{r}'} f_{km}(\mathbf{v}', \mathbf{r}', t) d^3 v' d^3 r' \right).$$

Из кинетических уравнений (13.12) можно получить гидродинамические уравнения, умножая (13.12) на инварианты столкновений и интегрируя по скоростям. Уравнения

гидродинамики с учетом процессов имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \rho \mathbf{v}_0 &= 0, \\ \frac{\partial n_k}{\partial t} + \nabla \cdot n_k \mathbf{v}_0 &= -\nabla \cdot \mathbf{i}_k + \dot{n}_k, \\ \rho \left[\frac{\partial \mathbf{v}_0}{\partial t} + (\mathbf{v}_0 \cdot \nabla) \mathbf{v}_0 \right] &= -\nabla p + \nabla \cdot \sigma' + \sum_k n_k \mathbf{F}_k, \\ p \left[\frac{\partial u}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla u \right] &= -p \nabla \cdot \mathbf{v}_0 - \sigma' : \nabla \mathbf{v}_0 + \sum_k \mathbf{i}_k \cdot \mathbf{F}_k - \nabla \cdot \mathbf{q}. \end{aligned} \quad (13.14)$$

Здесь p - изотропное давление, σ' - тензор вязких напряжений, \mathbf{q} - поток энергии, \mathbf{i}_k - массовый поток компонента

$$\begin{aligned} \sigma' &= \sum_{k,k} \int (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) f_{kn}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v, \\ \mathbf{q} &= \sum_{k,n} \int \left[\frac{m_k (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0)^2}{2} + E_{kn} \right] \mathbf{v} f_{kn}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v, \\ \mathbf{i}_k &= \sum_n \int (\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) f_{kn}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3 v. \end{aligned}$$

Член \dot{n}_k в уравнении (13.14) появился в результате интегрирования члена, описывающего неупругие столкновения в кинетическом уравнении (13.12). При малых отклонениях от состояния термодинамического равновесия он имеет порядок

$$\dot{n}_k \sim \frac{n_k - n_{k0}}{\tau_{\text{хим}}}, \quad \tau_{\text{хим}}^{-1} \sim n \langle Q_{\text{н}} V \rangle \sim n Q_{\text{н}} V_T e^{-\varepsilon_k/kT}.$$

Здесь $\tau_{\text{хим}}$ - характерное время неупругого процесса, описывающего приближение к равновесию по концентрации компонента n_k . Порядок величины $\tau_{\text{хим}}$ определяется частотой неупругих столкновений, которая, как указывалось ранее, определяется долей частиц, имеющих выше пороговой и поэтому имеет температурную зависимость Аррениуса для скорости химических реакций. Если ввести характерное диффузионное время $\tau_{\text{дифф}} \sim L^2/\mathcal{D}$, где L - характерный размер неоднородности, $\mathcal{D} \sim V_T/nQ_y$ - коэффициент диффузии частиц, то отношение характерных времен

$$\varepsilon = \frac{\tau_{\text{дифф}}}{\tau_{\text{хим}}} = \frac{L^2}{\mathcal{D}\tau_{\text{хим}}} \sim (LnQ_y)(LnQ_{\text{н}})e^{-\varepsilon/kT} \sim \frac{L}{l_{\text{н}}} K n e^{-\varepsilon/kT}, \quad (13.15)$$

определяет "замороженность" течения ($\varepsilon = 0$) или локальное химическое равновесие ($\varepsilon = \infty$). В (13.15) $l_{\text{н}}$ - длина пробега частиц относительно неупругого процесса, $K_n = LnQ_y = L/l_y$ - число Кнудсена. При низких температурах течение газа является замороженным ($\varepsilon = 0$), поэтому в уравнениях диффузии компонент (13.14) можно не учитывать члена, определяющего химические реакции (\dot{n}_k) в (13.14) становится определяющим, в этом случае удобно использовать другое приближение, вводя вместо концентраций компонентов n_k концентрации химических элементов n_α , а число которых обычно гораздо меньше числа компонентов [25]:

$$n_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_k n_k(\mathbf{r}, t) u_{k\alpha},$$

где $u_{k\alpha}$ - число ядер химического элемента α в компоненте k . Удобство введения новых переменных n_α в случае локального химического равновесия связано с тем, что при протекании химических реакций число ядер элемента α не изменяется, если только не рассматриваются ядерные реакции, поэтому уравнения диффузии элементов имеют вид

$$\frac{\partial n_\alpha}{\partial t} + \nabla \cdot n_\alpha \mathbf{v}_0 = -\nabla \cdot \mathbf{i}_\alpha, \quad \mathbf{i}_\alpha = \sum_k u_{\alpha k} \mathbf{i}_k.$$

После решения задачи и вычисления концентраций элементов, используя уравнения химического равновесия, можно найти концентрации компонентов и уточнить степень приближения, связанного с малостью всех членов в уравнении (13.14) кроме \dot{n}_k . В гидродинамические уравнения входят тензор вязких напряжений, тепловой и массовый потоки, которые после решения кинетических уравнений для реагирующих газов, например, методом Чепмена-Энскога, должны быть представлены в виде законов Фика, Фурье с коэффициентами переноса, вычисленными с учетом химических реакций. Эта процедура аналогична рассмотренной в главе 10, но более громоздка. В результате вычислений оказывается, что коэффициент диффузии и вязкости не изменяются, а теплопроводность существенно меняется вследствие переноса внутренней энергии при диффузии частиц. Это слагаемое в теплопроводности называется "химической теплопроводностью".

13.2 Эффективные коэффициенты переноса плазмы

При конструировании устройств, в которых рабочее тело находится в плазменном состоянии, необходимо решить проблему теплозащиты поверхностей, соприкасающихся с плазмой. Тепловые потоки, генерируемые плазмой, определяются профилями концентраций компонентов в плазменном объеме. Следовательно, при исследовании теплообмена многокомпонентной плазмы с ограничивающими поверхностями в ГЯР, каналах МГД-генераторов, за ударной волной, отошедшей от космического аппарата при его движении с гиперзвуковой скоростью в атмосфере планеты, важен корректный учет многокомпонентной диффузии. В указанных случаях плазму следует рассматривать как химически равновесную и квазинейтральную, т. е. воспользоваться приближением ЛТР и перейти от исследования диффузии компонент к исследованию диффузии химических элементов. Существенное влияние на конвективный тепловой поток и газодинамические характеристики течения плазмы оказывает диффузионный перенос тепла, описываемый эффективными коэффициентами теплопроводности. Коэффициенты транспортной теплопроводности (λ') и сдвиговой вязкости (η) также нужны для замыкания системы газодинамических уравнений.

В данном параграфе обсуждаются определение и общие свойства эффективных коэффициентов переноса, также модели для вычисления эффективных коэффициентов переноса, коэффициентов сдвиговой вязкости и транспортной теплопроводности неидеальной плазмы, с помощью которой проведены расчеты таблиц значений переносных коэффициентов плазмы щелочных металлов, урана и их смесей в широком диапазоне параметров.

Формальное определение эффективных коэффициентов переноса неидеальных сред через феноменологические коэффициенты и исследование от общих свойств возможно с помощью линейной по градиентам термодинамики необратимых процессов

[17]. Определение эффективных коэффициентов переноса через временные корреляционные функции также может быть проведено на основе одного из вариантов теории неравновесных процессов, обсуждаемой в 11.2. Воспользуемся первым подходом как более наглядным и быстрее приводящим к цели. Сформулируем выражение для производства энтропии ($\dot{\sigma}$) неидеальной многоэлементной плазмы в приближении ЛТР, т. е. относительно химических элементов [24]

$$\dot{\sigma} = -\frac{1}{T^2} \mathbf{q}' \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{a=1}^{N_\alpha} \mathbf{i}_\alpha \left(T \nabla \frac{\mu_\alpha}{T} - Z_\alpha \mathbf{E}^* \right) - \frac{1}{T} \Pi_{ij} \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \quad (13.16)$$

Согласно второму началу термодинамики, $\dot{\sigma} \geq 0$. Выражение (13.16) получено стандартным способом [17], [24] при использовании феноменологических законов сохранения в форме (13.1)—(13.5), $\mu_\alpha = (\partial u / \partial c_\alpha)_{p,s,c_b \neq c_\alpha}$ — удельный химический потенциал элемента α , и $u = u(p, s, \{c_\alpha\}, \tilde{z})$. Для преобразования (13.16) к более удобному виду подставим в данное выражение соотношение Гиббса—Дюгема

$$T \nabla \left(\frac{\mu_\alpha}{T} \right) = \nabla_T \mu_\alpha - \left(\frac{h_\alpha}{T} \right) \nabla T,$$

, симметричный тензор вязких напряжений в форме (13.9) и используем условие $\sum_{a=1}^{N_\alpha} i_\alpha = 0$, тогда

$$\dot{\sigma} = -\frac{1}{T^2} \mathbf{q}' \nabla T - \frac{1}{T} \sum_{a=1}^{N_\alpha-1} \mathbf{i}_\alpha \left[\nabla_T (\mu_\alpha - \mu_e) - \frac{e}{m_e} \mathbf{E}^* \right] - \frac{1}{T} (\Pi \nabla \mathbf{v} + \Pi' : \mathbf{T}). \quad (13.17)$$

В (13.17) выделен химический элемент «электроны», заряд которого на единицу массы есть $Z_e = -e/m_e$, (остальные Z_α равны нулю),

$$\mathbf{T} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \nabla \mathbf{v}, \quad \mathbf{q}' = \mathbf{q} - \sum h_\alpha \mathbf{i}_\alpha,$$

h_α — удельная энтальпия химического элемента. Перепишем (13.17) $\dot{\sigma} = \sum_i j_i X_i \geq 0$, здесь j_i — потоки, X_i — термодинамические силы. Потоки являются линейными функциями термодинамических сил: $j_i = \alpha_{ik} X_k$, таким образом:

$$\dot{\sigma} = \sum_{i,k} \alpha_{ik} X_k X_i, \quad (13.18)$$

(α_{ik} — феноменологические коэффициенты переноса (13.18)). Потоки и термодинамические силы в (13.17) линейно независимы между собой, следовательно, σ представляет собой положительно определенную квадратичную форму, удовлетворяющую критерию Сильвестра, согласно которому все главные миноры матрицы, составленной из феноменологических коэффициентов, — неотрицательны. Другим свойством α_{ik} является симметричность или антисимметричность относительно индексов i, k в изотропной среде — соотношения взаимности Онсагера [38]. Симметричность α_{ik} имеет место в случае, если параметры состояния, обозначенные индексами i и k , являются одновременно четными или нечетными функциями скоростей всех частиц, антисимметричность — когда параметры j_i и X_k имеют разную четность [38]. Соотношения взаимности справедливы и для линейно зависимых потоков и термодинамических сил [17].

Феноменологические уравнения переноса $j_i = \alpha_{ik} X_k$ связывают, вообще говоря, потоки и термодинамические силы разной тензорной размерности. Однако, если j_i и X_k имеют разную тензорную размерность, при преобразованиях вращения и отражения системы координат декартовы компоненты j_i и X_k преобразуются различно. Может оказаться, что из-за свойств симметрии рассматриваемой системы потоки будут зависеть не от всех термодинамических сил. Данное утверждение носит название принципа Кюри [17]. В изотропной среде j_i и X_k , различной тензорной размерности не связаны друг с другом. Следствием изотропности среды является то, что α_{ik} — скаляры, кроме того, производство энтропии в форме (13.17) можно разбить на три слагаемых—скалярное σ_0 , векторное σ_1 и тензорное σ_2 , каждое из которых неотрицательно. В изотропной среде для массового потока химического элемента и \mathbf{q}' имеем:

$$\mathbf{q}' = -\alpha_{QQ} \frac{\nabla T}{T^2} - \frac{1}{T} \sum_{a=1}^{N_\alpha-1} \alpha_{Qa} \left[\nabla_T(\mu_\alpha - \mu_e) - \frac{e}{m_e} \mathbf{E}^* \right], \quad (13.19)$$

$$\mathbf{i}_\alpha = -\alpha_{aQ} \frac{\nabla T}{T^2} - \frac{1}{T} \sum_{b=1}^{N_\alpha-1} \alpha_{ab} \left[\nabla_T(\mu_b - \mu_e) - \frac{e}{m_e} \mathbf{E}^* \right]$$

Из соотношений взаимности Онсагера и положительности векторного слагаемого в производстве энтропии, очевидно, следует: $\alpha_{aQ} = \alpha_{Qa}$, $\alpha_{ab} = \alpha_{ba}$, $\alpha_{QQ} > 0$, $\alpha_{aa} > 0$, поскольку $\alpha_{QQ}/T^2 = \tilde{\lambda}$ то $\tilde{\lambda} > 0$, из $\sigma_0, \sigma_2 > 0$ следует положительная определенность сдвиговой и объемной вязкостей.

Определим эффективные коэффициенты диффузии и теплопроводности многоэлементной неидеальной плазмы. При условии, что давление в плазме постоянно, выразим $\nabla_T(\mu_\alpha - \mu_e)$ через градиенты c_α (членами $\propto z$ пренебрегаем) и, подставив полученное выражение в (13.19), обозначая

$$\left[\frac{\partial(\mu_\alpha - \mu_e)}{\partial c_\beta} \right]_{p,T,c_\beta \neq c_\alpha} \equiv \mu_\beta^a$$

будем иметь

$$\mathbf{i}_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N_\alpha-1} D_{\alpha\beta} \nabla c_\beta + D_\alpha^T \nabla T - D_\alpha^E \mathbf{E}^*,$$

$$D_{\alpha\beta} = -\frac{1}{T} \sum_{f=1}^{N_\alpha-1} \alpha_{af} \mu_\beta^f, \quad D_\alpha^T = -\frac{\alpha_{aQ}}{T^2}, \quad D_\alpha^E = -\frac{e}{m_e T} \sum_{\beta=1}^{N_\alpha-1} \alpha_{ab}. \quad (13.20)$$

Аналогично для теплового потока:

$$\mathbf{q} = (\tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}_T) \nabla T + \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha-1} \lambda_\alpha \nabla c_\alpha - \lambda_E \mathbf{E}^*, \quad \tilde{\lambda}_T = \sum_{a=1}^{N_\alpha-1} (h_\alpha - h_e) D_\alpha^T,$$

$$\lambda_\alpha = \sum_{\beta=1}^{N_\alpha-1} \left[-\frac{\alpha_{Q\beta}}{T} \mu_\alpha^b - (h_b - h_e) D_{ba} \right], \quad \lambda_E = \frac{e}{T m_e} \sum_{a=1}^{N_\alpha-1} \left[-\alpha_{Qa} + (h_\alpha - h_e) D_\alpha^E \right]. \quad (13.21)$$

Формулы (13.20), (13.21) удобны при исследовании свойств эффективных коэффициентов переноса.

Рассмотрим следствие положительности производства энтропии для двухэлементной смеси, введем обозначения

$$-\lambda'_\alpha = -(1/T)\alpha_{Qa}\mu_\alpha^a, \quad \lambda''_\alpha = -(h_\alpha - h_b)D_{aa}, \quad \lambda_\alpha = \lambda'_\alpha + \lambda''_\alpha,$$

тогда

$$q' = -\tilde{\lambda}\nabla T + \lambda'_\alpha \nabla c_\alpha$$

(члены $\propto E^*$ отбросим для простоты). После подстановки \mathbf{q}' и \mathbf{i}_α в выражение для $\dot{\sigma}$ (13.17) и простых преобразований с использованием условия устойчивости относительно диффузии [17]: $\mu_\alpha^a > 0$, получим $\tilde{\lambda}D_{aa} > \lambda'_\alpha D_\alpha^T$. Из (13.20), (13.21), очевидно, следует: $\lambda''_\alpha D_\alpha^T = -\tilde{\lambda}_T D_{aa}$, поэтому

$$(\tilde{\lambda} - \tilde{\lambda}_T) D_{aa} > \lambda_\alpha D_\alpha^T. \quad (13.22)$$

Также можно убедиться в знакоопределенности эффективного коэффициента диффузии: $-D_{aa} > 0$, D_α^T не имеет определенного знака. Для эффективного коэффициента термодиффузии справедливы предельные соотношения $D_\alpha^T(T, p, c_\alpha = 0) = D_\alpha^T(T, p, c_\alpha = 1) = 0$, закон стремления D_α^T к нулю при $c_\alpha \rightarrow 0$ зависит от состава смеси, температуры и давления.

В случае смеси, состоящей из трех и более химических элементов, в общем виде не удается получить наглядные соотношения между эффективными коэффициентами переноса из условия $\sigma_1 > 0$. Например, для трехэлементной плазмы векторному слагаемому производства энтропии в форме (13.17) соответствует симметричная положительно определенная матрица с элементами A_{ij} ($\lambda'_\alpha \equiv \sum_b D_b^T \mu_\alpha^b T$):

$$\begin{aligned} A_{11} &= \frac{\tilde{\lambda}}{T^2}, \quad A_{22} = \frac{D_{aa}}{T} \mu_\alpha^a + \frac{D_{ba}}{T} \mu_\alpha^b, \quad A_{33} = \frac{D_{bb}}{T} \mu_b^b + \frac{D_{ab}}{T} \mu_b^a, \\ A_{12} &= \frac{D_\alpha^T}{T} \mu_\alpha^a + \frac{D_b^T}{T} \mu_\alpha^b, \quad A_{13} = \frac{D_\alpha^T}{T} \mu_b^a + \frac{D_b^T}{T} \mu_b^b, \\ A_{23} &= \frac{1}{2} \left(\frac{D_{ab}}{T} \mu_\alpha^a + \frac{D_{aa}}{T} \mu_b^a + \frac{D_{bb}}{T} \mu_\alpha^b + \frac{D_{ba}}{T} \mu_b^b \right). \end{aligned} \quad (13.23)$$

Вычисляя детерминант или главные миноры матрицы (13.23) и в каком-либо приближении термодинамические производные μ_α^b можно найти соотношения в виде неравенств между эффективными коэффициентами диффузии и теплопроводности - $\tilde{\lambda}$. Исследование матрицы типа (13.23), соответствующей σ_1 в форме (13.16), и связей между эффективными коэффициентами диффузии и теплопроводности, по видимому, нецелесообразно, т. к. последние выражаются через D_{ab} , D_α^T , D_α^E , h_α , μ_α^a (ср. (13.21) и (13.20)).

Соотношения взаимности Онсагера для феноменологических коэффициентов переноса также накладывают определенные ограничения на эффективные коэффициенты диффузии. Матрицы феноменологических коэффициентов $\alpha_{ab} - \alpha$, $\mu_b^a - \mu$, $D_{ab} - D$ очевидным образом связаны между собой (см. (13.22)): $D = -\alpha\mu$, $\alpha = -D\mu^{-1}$, поскольку $\alpha = \tilde{\alpha}$, то

$$D\mu^{-1} = \tilde{\mu}^{-1}\tilde{D}. \quad (13.24)$$

Рассчитывая термодинамические производные в матрице μ и приравнивая соответствующие элементы левой и правой частей (13.24), можно получить соотношения между эффективными коэффициентами диффузии в форме равенств.

Линейная по градиентам термодинамика необратимых процессов не дает рецепта для вычисления коэффициентов переноса, т. к. является феноменологической теорией. Теория неравновесных процессов (11) связывает коэффициенты переноса с соответствующими корреляционными функциями, расчет которых для неидеальной плазмы затруднен. Сформулируем модельный подход к вычислению эффективных коэффициентов переноса многоэлементной неидеальной плазмы [32], основанный на химической модели плазмы и использованный при расчете таблиц значений эффективных коэффициентов. Массовые потоки химических элементов определяются через массовые потоки компонентов плазмы. Приведем выражения для массового потока компонента, а также конвективного теплового потока, которые следуют из выражения для производства энтропии, сформулированного относительно компонентов, принципа Кюри для изотропной плазмы и совпадают с выражениями, принятыми в кинетической теории [16] в приближении идеальной плазмы ($p = const$):

$$\begin{aligned} \mathbf{i}_k &= \frac{n^2}{\rho} m_k \sum_{j=1}^N D_{kj} m_j \mathbf{d}_j - D_k^T \nabla T \\ \mathbf{q} &= -\lambda' \nabla T - \sum_{k=1}^N h_k \mathbf{i}_k - nkT \sum_j \frac{D_j^T}{n_j m_j} \mathbf{d}_j \\ \mathbf{d}_j &= \frac{\rho_j}{p} \nabla_{T,p} \mu_j - \frac{\rho_j}{p} \left(\frac{Z_j e}{m_j} \mathbf{E}^* - \sum_{i=1}^N \frac{n_i Z_i e}{\rho} \mathbf{E}^* \right). \end{aligned} \quad (13.25)$$

В (13.25) $n = \sum n_i$, h_i — энтальпия на единицу массы компонента i , D_{ij} — многокомпонентные коэффициенты диффузии (МКД), D_i^T — коэффициенты термодиффузии, последним членом в \mathbf{d}_j ($\sim \rho^*$) в дальнейшем пренебрегаем. Химический потенциал на единицу массы компонента плазмы согласно химической модели выражается в виде:

$$\mu_i = \left(\frac{kT}{m_i} \right) \ln n_i + \chi_i(T) + \Delta\mu_i,$$

а величина $\chi_i(T)$ связана со статсуммой компонента i [38], $\Delta\mu_i$ — вклад из-за взаимодействия. Отбросим $\Delta\mu_i$ в \mathbf{d}_j (противоположный случай рассматривается в [32]), тогда уравнения химического равновесия могут быть записаны в «идеальной» форме

$$x_i = \prod_{t=1}^{N_\alpha+1} x_t^{u_{it}} K_i(T, p), \quad x_t = x_t(c_1 \dots c_{N_\alpha-1}, p, T)$$

причем в ЛТР $x_t = x_t(c_1 \dots c_{N_\alpha-1}, p, T)$ ($\{x_t\}$ — набор относительных концентраций базисных компонент, u_{it} — стехиометрический коэффициент, $K_i(T, p)$ — константа равновесия i -й реакции, $x_i = n_i/n$), первый член в \mathbf{d}_j равен ∇x_j . Выразим ∇x_j через ∇c_α и ∇T , воспользовавшись уравнениями химического равновесия в идеальной форме и зависимостью $x_t = x_t(p, T, \{c_\alpha\})$, затем подставим ∇x_j в \mathbf{d}_j , \mathbf{d}_j , в \mathbf{i}_k и \mathbf{q} (13.25) и \mathbf{q} , после этого, сгруппировав члены при одинаковых градиентах, получим эффективные коэффициенты теплопроводности для конвективного теплового потока и диффузии для массового потока химического элемента [49], [33]:

$$\lambda^T = \sum_{i,j=1}^N h_i \frac{n^2}{\rho} m_j D_{ij} x_j \left[\frac{1}{x_j} \left(\frac{\partial x_j}{\partial T} \right)_{p, \{x_i\}} + \sum_{t=1}^{N_\alpha+1} \frac{u_{jt}}{x_t} \left(\frac{\partial x_t}{\partial T} \right)_{p, \{c_\alpha\}} \right] -$$

$$\begin{aligned}
 & - \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{h_i D_i^T}{m_i} + kT^2 \frac{D_i^T}{m_i} \left[\frac{1}{x_i} \left(\frac{\partial x_i}{\partial T} \right)_{p, \{x_i\}} + x_i \sum_{t=1}^{N_\alpha+1} \frac{u_{it}}{x_t} \left(\frac{\partial x_t}{\partial T} \right)_{p, \{c_\alpha\}} \right] \right\}, \\
 \lambda_\alpha = & \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{n^2}{\rho} h_i \sum_{j=1}^N m_j D_{ij} x_j \sum_{t=1}^{N_\alpha+1} \frac{u_{it}}{x_t} \left(\frac{\partial x_t}{\partial c_\alpha} \right)_{p, T, c_b \neq c_\alpha} \right] - \frac{kT^2 D_i^T}{m_i} \sum u_{it} \left(\frac{\partial x_t}{\partial c_\alpha} \right)_{p, T, c_b \neq c_\alpha} \right\}, \\
 & \lambda^E = \sum_{i=1}^N \left[\left(h_i \frac{n^2}{\rho} \sum_{j=1}^N m_j D_{ij} n_j Z_j e \right) - \frac{T D_i^T}{m_i} Z_i e \right], \\
 D_{ab} = & \sum_{i,j=1}^N m_\alpha u_{ia} \frac{n^2}{\rho} m_j D_{ij} x_j \sum_{t=1}^{N_\alpha+1} \frac{u_{jt}}{x_t} \left(\frac{\partial x_t}{\partial c_b} \right)_{p, T, c_\alpha \neq c_b}, \\
 D_\alpha^T = & \sum_{i,j=1}^N m_\alpha u_{ia} \left\{ \frac{n^2}{\rho} m_j D_{ij} x_j \left[\frac{1}{x_j} \left(\frac{\partial x_j}{\partial T} \right)_{p, \{x_t\}} + \sum_{t=1}^{N_\alpha+1} \frac{u_{jt}}{x_t} \left(\frac{\partial x_t}{\partial T} \right)_{p, \{c_\alpha\}} - \frac{D_i^T}{m_i} \right] \right\}, \\
 D_\alpha^E = & \frac{n^2}{\rho} \sum_{i,j=1}^N u_{ia} m_\alpha m_j D_{ij} n_j Z_j e.
 \end{aligned} \tag{13.26}$$

Очевидно, что тепловой поток q и эффективные коэффициенты теплопроводности зависят от уровня отсчета энергии, т. к. неопределенность содержится в h_i .

В литературе неоднократно вводились «эффективные коэффициенты» переноса с целью упрощения реальной многокомпонентной диффузии и теплопередачи. Обычно используется два способа учета многокомпонентной диффузии. В первом способе потоки различных компонентов выражаются через термодинамические силы (в частности, градиенты концентраций) с коэффициентами пропорциональности — многокомпонентными коэффициентами диффузии МКД, в другом методе Стефана—Максвелла, наоборот, градиенты концентраций выражаются через потоки с коэффициентами пропорциональности, называемыми коэффициентами сопротивлений, Обсуждение «гидродинамического приближения» для многокомпонентной диффузии в форме Стефана—Максвелла содержится в монографии [70]. Наиболее простой вид соотношения Стефана—Максвелла имеют в случае, когда используется первое приближение в разложении функции распределения по полиномам Сонина — тогда коэффициенты сопротивления равны обратным коэффициентам бинарной диффузии, а коэффициент термодиффузии равен нулю. В более высоких приближениях [16] коэффициенты сопротивления выражаются через определители, содержащие Ω_{ls}^* аналогично МКД.

Упрощение многокомпонентной диффузии в смесях было предложено в работе [153], где введено понятие о диффузии химических элементов в равновесной смеси двух элементов — урана и водорода. В работах [65] введены эффективные коэффициенты диффузии в «замороженном» течении, которые были вычислены в пограничном слое, в [65] обсуждаются приближенные выражения для этих коэффициентов в зависимости от молекулярных масс и диффузионных свойств различных компонентов. В [66], [64] рассматривалась многокомпонентная диффузия в форме Стефана—Максвелла в химически равновесных течениях, когда градиенты концентраций компонентов выражаются через градиенты химических элементов с использованием законов действующих масс, для плазмы предполагались равными нулю ток и внешняя разность потенциалов.

В настоящей работе используется описание многокомпонентной диффузии [24], [49], [33], когда потоки базисных элементов выражаются суммой потоков компонентов, участвующих в переносе данного элемента и в каждой точке выполняются условия локального термодинамического равновесия, позволяющие выразить градиенты концентраций компонентов через градиенты долей химических элементов. Для вычисления эффективных коэффициентов переноса по (13.26) необходимо иметь МКД, D_i^T , h_i , равновесный состав плазмы, производные базисные компонент по T и c_α . Определение последних проводилось численно на ЭВМ, расчет состава и h_i обсуждается в гл. 1. Модельный расчет МКД, D_i^T проведен на основе системы классических кинетических уравнений, столкновительные интегралы в которой складываются из I_α^y - интеграла упругих столкновений, описывающего столкновения нейтралов между собой и нейтралов с зарядами I^{ny} - интеграла неупругих столкновений и I_e^y - интеграла упругих столкновений, характеризующего взаимодействие заряженных частиц. Интеграл столкновений заряженных частиц выбран в форме Больцмана (I_e^y для слабонеидеальной плазмы рассмотрен в §2.2), причем потенциал взаимодействия заряд—заряд полагался дебаевским. Теоретическое обоснование указанного выбора интеграла столкновений I_e^y провести не удастся, но сравнение электропроводности (которая может быть выражена через МКД [16]) неидеальной плазмы цезия, вычисленной с помощью данного модельного кинетического уравнения, с известными экспериментальными результатами показывает удовлетворительное согласие [48]. Совпадение между значениями коэффициента сдвиговой вязкости неидеальной однокомпонентной кулоновской системы, рассчитанными методом молекулярной динамики [109] по формуле (??), и значениями, определенными из решения соответствующего модельного кинетического уравнения, также является неплохим. Таким образом, неучтенные в I_e^y в форме Больцмана кулоновские эффекты, вносят, по-видимому, малый численный вклад в кинетические коэффициенты неидеальной плазмы. Следовательно, применение модельной системы кинетических уравнений для вычисления коэффициентов переноса неидеальной плазмы является целесообразным.

13.3 Методика расчетов и результаты

В данном параграфе изложена методика вычисления коэффициентов переноса неидеальной плазмы, значения которых приведены на рисунках. Проведенный анализ и обсуждение экспериментальных данных обосновывают использование модельной системы кинетических уравнений для расчета переносных коэффициентов неидеальной плазмы. Столкновительный интеграл КУ, как указывалось выше, состоит из трех слагаемых, определяемых упругими столкновениями заряженных частиц между собой, упругими соударениями нейтральных и заряженных частиц и неупругими столкновениями частиц. Интеграл упругих столкновений заряженных частиц выбран в форме Больцмана с дебаевским потенциалом взаимодействия между частицами. Интеграл упругих столкновений нейтральных частиц и нейтралов с зарядами также выбран в больцмановской форме. В интеграл неупругих столкновений входят, вообще говоря, процессы, связанные с химическими превращениями частиц — диссоциацией, ионизацией и т. п., процессы, возбуждения, перезарядки, передачи возбуждения и др. Информация о неупругих столкновениях и столкновениях возбужденных частиц между собой весьма ограничена, существуют достаточно надежные данные о

перезарядке некоторых атомов на своих ионах [20], рассеянии электронов на возбужденных атомах [48]. Решение системы КУ с неупругим интегралом столкновений трудоемко, кроме того, не исследована сходимость расчетных значений коэффициентов переноса при увеличении числа ортогональных полиномов, использованных при их вычислении. Таким образом, вследствие двух обстоятельств: скудности информации о столкновениях возбужденных частиц и неупругих столкновениях, сложности выражений для коэффициентов переноса при учете неупругих соударений — в конкретных расчетах свойств переноса рабочих тел, обычно пренебрегается всеми неупругими процессами, за исключением перезарядки атома на своем ионе, предполагалось, что возбужденные частицы упруго взаимодействуют между собой, так же как частицы в основном состоянии. Упрощения, перечисленные выше, позволяют проводить разложение анизотропной части функции распределения частиц по полиномам Сонина.

Зависимость величины коэффициентов переноса от числа полиномов Сонина, использованных при их вычислении, исследовалась во многих работах [47], где установлено, что сходимость многокомпонентных коэффициентов диффузии и термодиффузии, через которые определяются эффективные коэффициенты переноса вязкости плазмы, а также теплопроводности неионизованных газов, весьма быстрая. Поскольку неопределенность в сечениях столкновений частиц плазмы рабочих тел составляет не менее 50%, для практических расчетов достаточно использовать выражения для многокомпонентных коэффициентов диффузии и вязкости в первом порядке по полиномам Сонина, коэффициентов термодиффузии и теплопроводности — во втором. Спитцеровская асимптотика [155] коэффициентов сдвиговой вязкости и транспортной теплопроводности в пределе полной ионизации обеспечивалась «исправлением» кулоновских сечений взаимодействия. Сходимость коэффициентов переноса — электропроводности и термо-э. д. с., определяющих электрический ток, для частично ионизованной плазмы медленная. Поэтому для расчета проводимости и термо-э. д. с. применялся интерполяционный метод Фроста (13.39) [47].

Выпишем формулы для коэффициентов переноса плазмы, использовавшиеся в расчетах. Коэффициенты термодиффузии компонентов имеют вид [16]

$$D_k^T = -\frac{8m_k}{5T} \frac{\begin{vmatrix} L_{ij}^{00} & L_{ij}^{01} & 0 \\ L_{ij}^{10} & L_{ij}^{11} & x_i \\ x_j \delta_{ik} & 0 & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} L_{ij}^{00} & L_{ij}^{01} \\ L_{ij}^{10} & L_{ij}^{11} \end{vmatrix}} \quad (13.27)$$

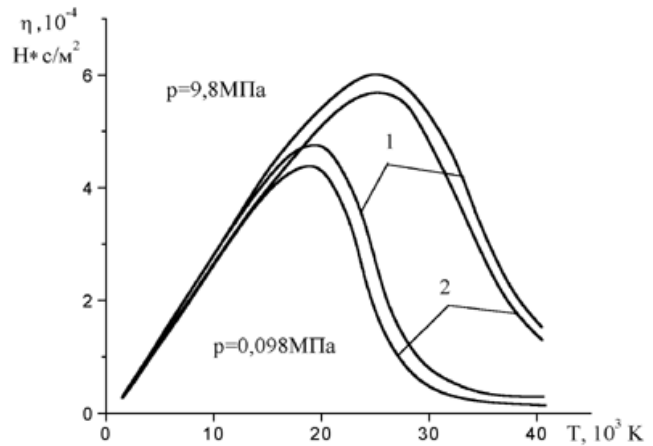


Рис. 13.1: Зависимость вязкости гелиевой плазмы от температуры: 1 - результаты авторов, 2 - [126]

В (13.27) L_{ij} представляют собой квадратные матрицы N -го порядка с элементами:

$$\begin{aligned}
 L_{ii}^{00} &= 0, \quad L_{ij}^{00} = 0, \quad 64 \frac{T}{p} \left(\frac{x_i x_j}{D_{ij}} + \sum_{k \neq i} \frac{x_i x_k m_j}{m_i D_{ik}} \right) \quad i \neq j, \\
 L_{ii}^{01} &= 1, \quad 6 \frac{T}{p} \sum_{k \neq i} \frac{x_i x_k m_k (1, 4C_{ik}^* - 1)}{(m_i + m_k) D_{ik}}, \\
 L_{ij}^{01} &= 1, \quad 6 \frac{T}{p} x_i x_j \frac{m_i (1, 4C_{ij}^* - 1)}{(m_i + m_j) D_{ij}} \quad i \neq j, \quad L_{ij}^{10} = \frac{m_j}{m_i} L_{ij}^{01}, \\
 L_{ii}^{11} &= -\frac{4x_i^2}{\lambda_i} - 0, \quad 64 \frac{T}{p} \sum_{k \neq i} \frac{x_i x_k (7, 5m_i^2 + 6, 25m_k^2 + 3m_k^2 B_{ik}^* + 4m_i m_k A_{ik}^*)}{(m_i + m_k)^2 D_{ik}}, \\
 L_{ij}^{11} &= 0, \quad 64 \frac{T}{p} \frac{x_i x_j m_i m_j}{(m_i + m_j)^2 D_{ij}} [13, 75 - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^*] \quad i \neq j,
 \end{aligned} \tag{13.28}$$

Здесь D_{ij} и λ_i , — бинарный коэффициент диффузии и теплопроводность «чистого газа» частиц i -го сорта.

$$D_{ij} = \frac{3}{16} \frac{k^2 T^2}{\mu_{ij} p \Omega_{ij}^{(1,1)}}, \quad \lambda_i = \frac{15}{4} \frac{k}{m_i} \eta_i. \tag{13.29}$$

Через выражения (13.28), (13.29) определена теплопроводность плазмы [16]

$$\lambda' = 4 \frac{\begin{vmatrix} L_{ij}^{00} & L_{ij}^{01} & 0 \\ L_{ij}^{10} & L_{ij}^{11} & x_i \\ 0 & x_j & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} L_{ij}^{00} & L_{ij}^{01} \\ L_{ij}^{10} & L_{ij}^{11} \end{vmatrix}} \tag{13.30}$$

Сечения взаимодействия заряженных частиц в (13.30) исправлялись таким образом, чтобы в пределе полной ионизации величина λ' в (13.31) совпадала со спитцеровским значением $\lambda'X$ и при следующей форме электронного теплового потока [47]:

$$\mathbf{q}^e = -\frac{5}{2} k T \frac{j_e}{e} - \lambda' \nabla T - T \alpha \left(\mathbf{E}^* - \frac{1}{e} \nabla_T \mu_e \right).$$

Вязкость смеси вычислялась по формуле [16]:

$$\eta = \frac{\begin{vmatrix} H_{ij}^{00} & x_i \\ x_j & 0 \end{vmatrix}}{|H_{ij}|}, \tag{13.31}$$

$$\begin{aligned}
 H_{ii} &= \frac{x_i^2}{\eta_i} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \frac{2x_i x_k}{(m_i + m_k)} \frac{RT}{p D_{ik}} \left[1 + 0, 6 \frac{m_k}{m_i} A_{ik}^* \right], \\
 H_{ij} &= -\frac{2x_i x_j}{m_i + m_j} \frac{RT}{p D_{ij}} [1 - 0, 6 A_{ij}^*] \quad i \neq j.
 \end{aligned}$$

При этом

$$\eta_i = \frac{5}{8} \frac{kT}{\Omega_{ii}^{(2,2)}}. \quad (13.32)$$

Многокомпонентные коэффициенты диффузии определяются следующим образом:

$$D_{ij} = \frac{1}{m_j} \sum_{k=1}^N x_k m_k \frac{K^{ji} - K^{ii}}{|K_{ij}|}, \quad (13.33)$$

$$K_{ii} = 0, \quad K_{ij} = \frac{x_i}{D_{ij}} + \frac{m_j}{m_i} \sum_{k \neq 1} \frac{x_k}{D_{ik}} \quad i \neq j,$$

где K^{ij} и K^{ii} представляют собой выражения

$$K^{ji} = (-1)^{i+j} \begin{vmatrix} 0 & \dots & K_{1,i-1} & K_{1,i+1} & \dots & K_{1,N} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ K_{j-1,1} & \dots & K_{j-1,i-1} & K_{j-1,i+1} & \dots & K_{j-1,N} \\ K_{j+1,1} & \dots & K_{j+1,i-1} & K_{j+1,i+1} & \dots & K_{j+1,N} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ K_{N,1} & \dots & K_{N,i-1} & K_{N,i+1} & \dots & 0 \end{vmatrix} \quad (13.34)$$

В формулах (13.28), (13.31), A^* , B^* , C^* :

$$A^* = \frac{\Omega^{(2,2)^*}}{\Omega^{(1,1)^*}}, \quad B^* = \frac{5\Omega^{(1,2)^*} - 4\Omega^{(1,3)^*}}{\Omega^{(1,1)^*}}, \quad C^* = \frac{\Omega^{(1,2)^*}}{\Omega^{(1,1)^*}}. \quad (13.35)$$

Здесь $\Omega_{ij}^{(l,s)^*}$ — определены через сечения взаимодействия i -й и j -й частиц

Потенциал	Форма	Параметры	Литература
Ленарда-Джонса	$4 \cdot \varepsilon \left[\left(\frac{\rho}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\rho}{r}\right)^6 \right]$	ρ, ε	[67]
Степенной	$-\varepsilon r^{-6} \mp \beta r^{7/2} \gamma^{-2} \exp(2\gamma r)$	$\beta, \varepsilon, \gamma$	[20]
Поляризационный	$-\varepsilon (r^2 + \rho^2)^{-2}$	ε, ρ	[129]
Экспоненциальный	$-\varepsilon \exp(-r/\rho)$	ε, ρ	[?]
Экранированный	$\pm \varepsilon (\rho/r) \exp(-r/\rho)$	ε, ρ	[59], [134]
Морзе	$\varepsilon \{ \exp[-2\beta(r - \rho)/\rho] - 2 \exp[-\beta(r - \rho)/\rho] \}$	ε, ρ, β	[154], [53]
	$\varepsilon \exp(-n_e)(r - r_e)^2/2r$	ε, n_e, r_e	[9]

Таблица 13.1: Типы используемых в расчетах потенциалов

$$\Omega_{ij}^{(l,s)^*} = \frac{\Omega_{ij}^{(l,s)} (2\pi \mu_{ij} / kT)^{1/2}}{\frac{1}{2}(s+1)! [1 - (1/2)(1 + (-1)^l / 1 + l)] \pi \rho^2}, \quad (13.36)$$

$$\Omega_{ij}^{(l,s)} = \left(\frac{kT}{2\pi \mu_{ij}} \right)^{1/2} \int_0^\infty e^{-\gamma^2} \gamma^{2s+1} Q_{ij}^{(l)} d\gamma, \quad (13.37)$$

$$Q_{ij}^{(l)} = 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos^l \theta) Q_{ij}(\theta, v) \sin \theta d\theta, \quad (13.38)$$

где $Q_{ij}(\theta, v)$ — дифференциальное сечение рассеяния, v — относительная скорость частиц, $\gamma = mv^2/2kT$, μ_{ij} — приведенная масса, ρ — константа, характеризующая взаимодействие сортов i и j . При вычислении коэффициентов переноса плазмы

использовались $\Omega_{ij}^{(l,s)*}$, затабулированные для разных потенциалов взаимодействия (табл. 13.3).

Параметры потенциалов взаимодействия нейтральных атомов и молекул приведены в табл. 13.3, взаимодействие нейтральных частиц с заряженными описывалось поляризационным потенциалом с величинами поляризуемостей, приведенными в табл. 13.3. Там же приведены резонансные уровни электронных энергий атомов и молекул, необходимые для оценки поляризуемости,

$$\alpha = 2 \sum_k^l \frac{(D_x^2)_{0k}}{E_k - E_0} = \sum_k^l \frac{f_{0k}}{(E_k - E_0)^2},$$

f_{0k} — сила осциллятора перехода $0 \rightarrow k$, при оценках сила осциллятора для резонансного перехода принималась равной единице. Оцененные значения поляризуемостей отмечены в табл. 13.3 знаком *. В тех случаях, когда потенциалы взаимодействия нейтральных частиц неизвестны, взаимодействия между ними считались дисперсионными и постоянные Ван-дер-Ваальса оценивались по формуле Лондона [20],

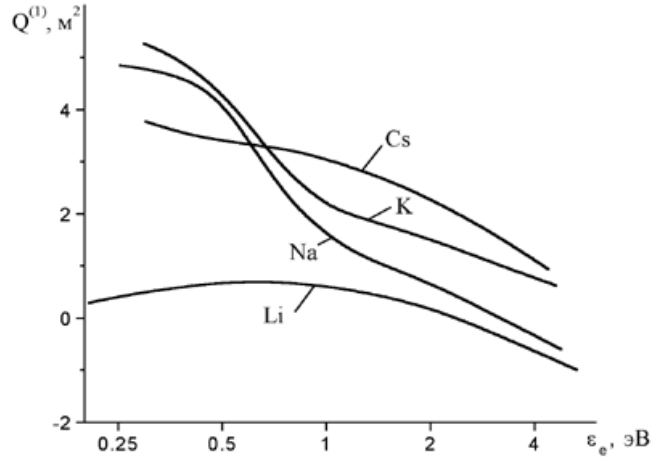


Рис. 13.2: Транспортное сечение рассеяния электронов на атомах щелочных металлов

$$c_{12} = \frac{3\alpha_1\alpha_2\Delta E_1\Delta E_2}{2(\Delta E_1 + \Delta E_2)}.$$

Параметры двухатомных молекул брались из обзора [51]. Для нечетных значений (l, s) в интегралах столкновений необходимо учитывать перезарядку. Сечения резонансной перезарядки вычислялись по асимптотической теории [57]:

$$Q = \frac{\pi R_0^2}{2}, \quad \frac{1}{v} \sqrt{\frac{\pi R_0}{2\gamma}} \Delta(R_0) = 0,28,$$

потенциал резонансного обменного взаимодействия равен (в а. е.)

$$\Delta = A^2 \exp\left(-\frac{1}{\gamma}\right) R^{2/\gamma-1} \exp(-R\gamma).$$

Параметры A и γ приведены в табл. 13.3.

Расчеты электропроводности и термо-э. д. с. плазмы проводились по формулам [47]:

$$\begin{aligned} \sigma &= \frac{4\pi n_e e^2}{3 kT} \int_0^\infty \frac{V^4}{\nu_e} f_e^0 dv, \\ \alpha &= \frac{4\pi n_e e}{3 T} \int_0^\infty \frac{V^4}{\nu_e} \left(\frac{m_e V^2}{2kT} - \frac{5}{2} \right) f_e^0 dv, \\ \nu_e &= \sum_a Q_{ea}^{(1)} v n_a + v \sum_i \gamma_{\sigma,\alpha}^{-1} (Z_i) n_i \frac{2\pi}{V^4} \left(\frac{Z_i e^2}{m_e} \right) \ln \left[1 + \left(\frac{3\sqrt{2}}{\Gamma} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (13.39)$$

Элемент	Потенциал	$\epsilon_{a,e}$	$\rho_{a,e}$	$\beta_{a,e}$	γ	Литература
$H_2 - H_2$	4	1.100(+2)	1.85			[40]
$H_2 - H$	4	5.145(1)	7.372			[40]
$H_2 - Li_2$	2	112		0		
$H_2 - LiH$	2	79,1		0		
$H_2 - Li$	2	77,4		0		[110]
$H - H$	6	1.745(-1)	1.401			
$H - Li_2$	2	89.8		0		
$H - LiH$	2	69.3		0		[9]
$H - Li$	4	1.786(-1)	1.197			[9], [81]
	4	1.531(-1)	1.218			
$Li_2 - Li_2$	2	2838		0		[119]
$Li_2 - LiH$	2	1787		0		
$Li_2 - Li$	2	2793		0		[110]
$LiH - LiH$	2	1152		0		[119]
$LiH - Li$	2	1216		0		[119]
$Li - Li$	2	1400		136.630		[52], [93]
$Cs - Cs$	2	5200		11.536		[93]
$Cs_2 - Cs_2$	2	451				
$Cs_2 - Cs$	2	2500				
$Li - K$	4	1.286(-3)	1.021			
$K_2 - K_2$	4	2.845	1.966			[99]
$K_2 - K$	4	1.569	4.556			
$K - U$	4	89.38	1.251			
$K - K$	4	27.78	2.21			[93],[77]
$K - U$	4	882	1.17			
$U - U$	4	2808	1.74			[77]
$K - H$	4	18.08	1.202			
$K_2 - H$	4	1.82	2.52			
$K - H_2$	4	190	1.59			
$K_2 - H_2$	4	3.4	2.908			
$Na_2 - Na_2$	4	10.14	2.759			
$Na_2 - Na$	4	5.661	3.1			
$Na - Na$	4	13.46	2.19			[77]

Примечание. В тех случаях, когда литература не указана, параметры потенциала оценивались по комбинационным правилам [106], либо рассчитывались константы вандерваальсовского взаимодействия по известным поляризуемостям частиц (табл. 13.3) и резонансным энергиям на основании формулы Лондона [20].

Таблица 13.2: Параметры потенциалов взаимодействия нейтральных частиц

Частица	H	Li	K	Cs	U	H_2	Li_2	K_2	LiH
$\alpha_{a,e}$	4.5	160	280	360	185*	5.52	243*	353*	133*
$\Delta E_{a,e}$.375	.0679	.0592	.0408	.0735	.0418	06.41	.0532	.0860

* - поляризуемость оценена в приближении $f = 1$ для резонансного уровня (f - сила осциллятора)

Таблица 13.3: Поляризуемости атомов и молекул и энергии резонансных возбуждений [57]

Атом, ион	H	Li	Na	K	Cs
γ	1,00	.629	.615	.565	.535
A	2,00	.82	.74	.52	.39

Таблица 13.4: Параметры, определяющие сечение резонансной перезарядки [104]

z	1	2	4	16	∞
γ_σ	.5116	.6833	.7849	.9225	1
γ_α	.2727	.4137	.5714	.8279	1

Таблица 13.5: Поправочные коэффициенты для проводимости и термо-э.д.с.

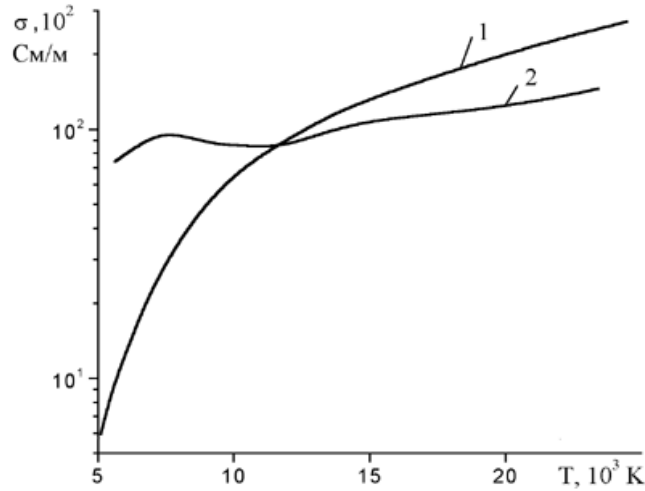


Рис. 13.3: Электропроводность цезиевой плазмы при давлении $p = 10$ МПа. 1 - результаты авторов, 2 - [26], 3 - спитцеровская составляющая электропроводности плазмы, 4 - [95]

Значения поправочных коэффициентов $\gamma_{\sigma,\alpha}$ приведены в табл. 13.3 [126].

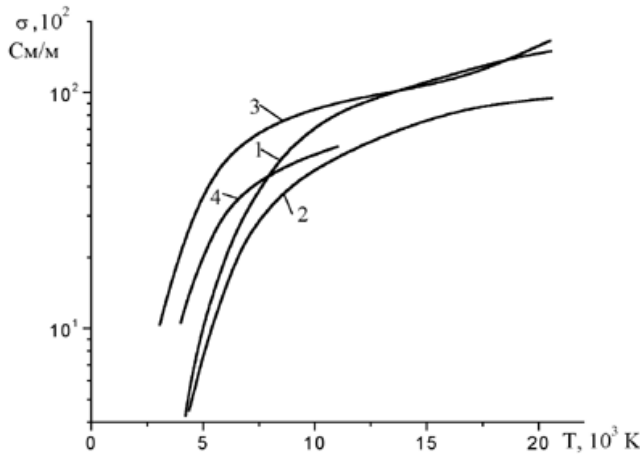


Рис. 13.4: Электропроводности цезиевой плазмы $p = 1$ МПа. 1 - результаты авторов, 2 - [26], 3 - спитцеровская составляющая электропроводности плазмы, 4 - [95]

Обсудим используемые в расчетах транспортные сечения рассеяния электронов на нейтралах. Для описания упругого рассеяния электрона на атоме и молекуле водорода, а также всех щелочных металлов, кроме цезия, использовались данные, систематизированные в [51]. Эти данные удобно использовать и по той причине, что они приведены в численном виде с мелким разбиением по энергиям электронов. Сечения рассеяния электронов на молекулах щелочных металлов и их гидридов рассчитывались по поляризационным потенциалам. Сечение рассеяния электрона на атоме урана аппроксимировалось оценкой [57].

Приведем выражение для коэффициента λ_x [91], соответствующего \mathbf{q} в виде

(13.25), без учета D_i^T :

$$\lambda_x = k \sum_{e=1}^m \frac{(\Delta H_e / RT)^2}{\sum_{i=1}^N \left(\frac{u_{ei}}{x_i} \right) \sum_{j=1}^N (u_{ei} x_j - u_{ej} x_i) \Delta_{ij}^{(1)}}, \quad (13.40)$$

$$\Delta H_e = RT^2 \frac{d \ln K_e(T, P)}{dT},$$

$$\Delta_{ij}^{(1)} = \frac{16}{5} \sqrt{\frac{2m_i m_j}{\pi k T (m_i + m_j)}} \pi \sigma^2 \Omega_{ij}^{(1,1)*}.$$

Здесь m — число химических реакций в плазме, $K_r(T, P)$ — константа e -ой химической реакции, уравнение которой записано в «идеальной» форме.

По приведенным выше формулам рассчитаны η , λ' , λ_x , σ , α для плазмы щелочных металлов Li , Na , K , Cs и плазмы урана. Сравнение с расчетными данными для слабонеидеальной плазмы Ar [20] по вязкости и суммарной теплопроводности ($\lambda' + \lambda_x$) показывает хорошее согласие (см. рис. 12.1—12.5), так же как и по многокомпонентным коэффициентам диффузии плазмы He [126]. Проводились сравнения по коэффициентам переноса водородной плазмы и других веществ [?], которые показывают, что методика, примененная для вычисления коэффициентов переноса неидеальной плазмы в области слабой неидеальности дает расчетные результаты, согласующиеся с известными данными. Некоторые расхождения связаны с различными методами расчета состава и разнородностью данных по элементарным процессам в плазме (рис. 13.1—13.2).

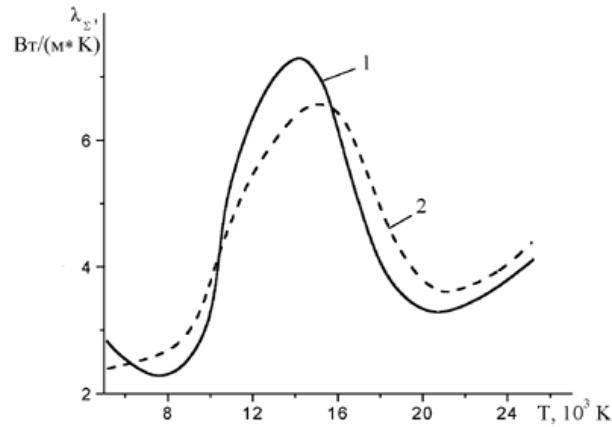


Рис. 13.5: Теплопроводность водородной плазмы при высоких температурах, $p = 0,1$ МПа: 1 - результаты авторов, 2 - [95]

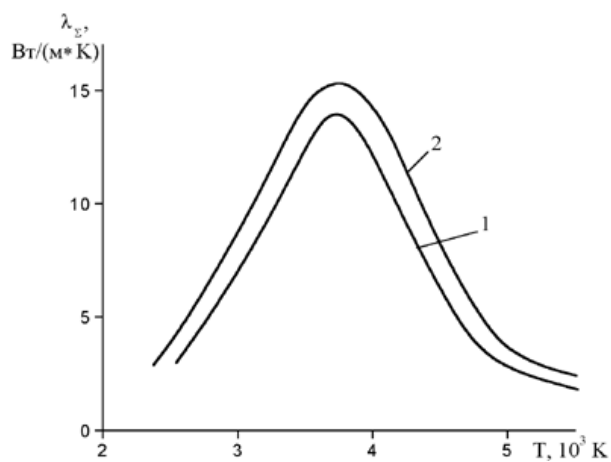


Рис. 13.6: Теплопроводность водородной плазмы при низких температурах, $p = 0,1 \text{ МПа}$: 1 - результаты авторов, 2 - [86]

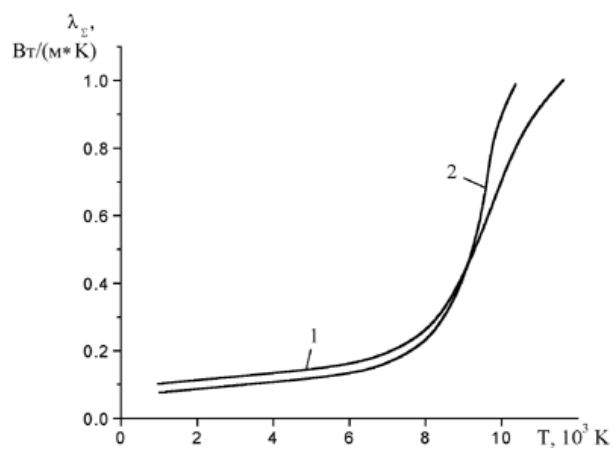


Рис. 13.7: Теплопроводность аргонной плазмы $p = 1 \text{ МПа}$: 1 - результаты авторов, 2 - [20]

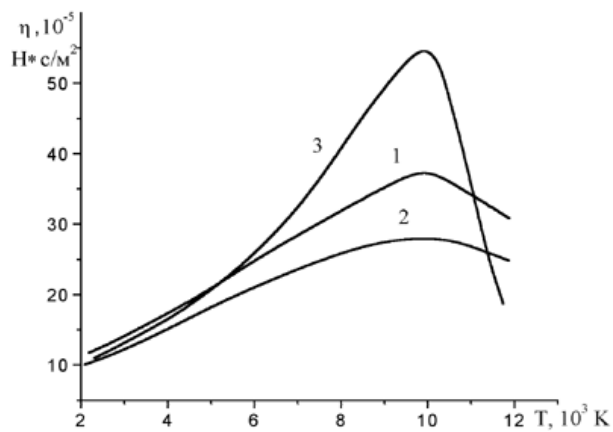


Рис. 13.8: Вязкость аргонной плазмы при $p = 1 \text{ МПа}$: 1 - результаты авторов, 2 - [20]

Литература

- [1] Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский Н.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: ГИФМЛ. 1962.
- [2] Александров Н.Л. Коновалов В.П., Сон Э.Е. Явления переноса заряженных частиц в слабоионизованном газе, Энциклопедия по физике низкотемпературной плазме, М.: Наука, 2000.
- [3] Алексеев В.А. // ТВТ. 1970. Т.8. №3, С.641.
- [4] Алексеев В. А., Андреев А. А., Прохоренко В. Я. // УФН. 1972 Т.106. №2. С.393.
- [5] Алексеев В. А., Веденов А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1970. Т.12. №7. С.501.
- [6] Алексеев В. А., Веденов А. А. // Письма в ЖЭТФ. 1972. Т.16. №2. С.73.
- [7] Бабилов В. В. Метод фазовых функций. М.: Наука, 1966.
- [8] Базь А.И., Зельдович Я.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, 1971. 544С.
- [9] Белов В.А., Ключников Н.И. // ТВТ. 1965. Т.3. №3. С.645.
- [10] Н.Н.Боголюбов, Проблемы динамической теории в статистической физике. М: Гостехиздат, М.-Л., 1946.
- [11] Валуев А.А., Норман Г.Э. // ТВТ. 1977. Т.15. №3. С.191.
- [12] Ветчинин С.П., Храпак А.Г., Якубов И.Т. // ТВТ. 1972. Т.10. №5. С.954.
- [13] Воробьев В.С., Хомкин А.Л. // Физика плазмы. 1977. Т.3. №4. С.885.
- [14] Встовский В. Диаграммные методы в плазме М.1968.
- [15] Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г., Кузнецова Н.И., Кучеренко В.И., Лаппо Г.Б., Ломакин Б.Н., Павлов Г.А., Сон Э.Е., Фортов В.Е. Теплофизические свойства рабочих сред газозонового ядерного реактора (под ред. Иевлева В.М. - М.: Атомиздат, 1980)
- [16] Гиршфельдер Дж, Кертисс Е., Берд Л. Математическая теория газов и жидкостей М.: 1961.
- [17] Де Гроот С., Мазур П.— Неравновесная термодинамика. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1974.
- [18] Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. М., 1979. С. 480.

- [19] Дихтер И. Я., Зейгарник В. А. — ДАН СССР, 1976, т. 227, № 2, с. 656.
- [20] Елецкий А.В., Палкина Л.А., Смирнов Б.М. Явления переноса в слабоионизованной плазме, М., Атомиздат, 1975.
- [21] Жданов В.М., Сон Э.Е. Феноменологическое и кинетическое описание процессов переноса в низкотемпературной плазме. Энциклопедия по физике низкотемпературной плазме, Изд-во Наука, 2000 г.
- [22] Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика (М.: Наука, 1971)
- [23] Иванов Ю. В., Минцев В. Б. и др. — ЖЭТФ, 1976, т. 71, № 1. с. 216.
- [24] Иевлев В.М. Турбулентное движение высокотемпературных сплошных сред. М., Наука, 1975.
- [25] Иевлев В.М., Сон Э.Е., Гидродинамическое описание высокотемпературных сред, изд. МФТИ, г.Долгопрудный, 1977.
- [26] Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Рогов В.С. Таблицы термодинамических функций и транспортных коэффициентов плазмы. Препринт ИПМ АН СССР, 1972.
- [27] Каклюгин А. С., Норман Г. Э.— ТВТ, 1973, т. 11, № 2, 238.
- [28] Кикоин И. К., Сенченков А. П.— Физика металлов и металловедение, 1967, т. 24, № 4, с. 843.
- [29] Климонтович Ю.Л., Кинетическая теория неидеального газа и неидеальной плазмы, М., "Наука", 1975.
- [30] Коваленко Н.П., Красный Ю.П., Тригер С.А. Статистическая теория жидких металлов. М.: Наука, 1990.
- [31] Кудрин Л. П., Дозоров А. А. - Атомная энергия, 1969, г. 27, № 1, с. 39.
- [32] Кучеренко В. И., Павлов Г. А.— ЖПМТФ, 1978, № 5, с. 43.
- [33] Кучеренко В.И., Павлов Г.А., Сон Э.Е. - ТВТ, 1976, т. 14, № 5, с. 921.
- [34] Кучеренко В.И., Павлов Г.А., Грязнов В.К., Сон Э.Е., Фортов В.Е., Теплофизические свойства плазмы смеси гелия с водородом в интервале температур 2800-3000 К и давлений 1-100 атм., препринт, Черногловка, 1978.
- [35] Лагарьков А. Н., Сарычев А. К. — ТВТ, 1977, т. 15, № 3, с. 645.
- [36] Ландау Л.Д., ЖЭТФ, 7, 203, 1937.
- [37] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
- [38] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. М., Наука, 1964.
- [39] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1971.
- [40] Леонас В. Б., Беляев Ю. Н. — ДАН СССР, 1967, т. 173, № 12, с. 306.
- [41] Ли Цзун Дао, Математические методы в физике, М., ИЛ, 1963.

- [42] Ликальтер А.А. УФН. 1992. Е. 162. С. 119.
- [43] Лифшиц У.М., Питаевский Л.П. Статистическая физика. М., Наука, 1979.
- [44] Маев С. А.— ЖТФ, 1970, т. 40, № 3, с. 567.
- [45] Максимов Л.А., Ильин А.В., Лекции по физической кинетике, изд.МФТИ, г.Долгопрудный, 1974.
- [46] Мартин П., Швингер Ю. Теория систем многих частиц. М. 1962.
- [47] Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы. Пер. с англ. М., Мир, 1976.
- [48] Павлов Г. А., Кучеренко В. И.— ТВТ, 1977, т. 15, № 2, с. 409.
- [49] Павлов Г.А., Сон Э.Е. ПМТФ, 1975, № 6, с. 51.
- [50] Подлубный Л. И.— ТВТ. 1975, т. 13, № 5. с. 1081.
- [51] Радциг А.А. Параметры двухатомных молекул, Энергшоатомиздат, 1975
- [52] Самуилов Е. В., Воскресенская Н. В.— В кн.: Исследования по физической газодинамике. М., Наука, 1966.
- [53] Самуилов Е. В., Цителаури Н. Н.— ТВТ, 1964, т. 2, № 3, с. 565, ТВТ, 1969, т. 7, № 1, с. 167.
- [54] Сеченов В. А., Сон Э. Е., Щекотов О. Е.— ТВТ, 1977, т. 15, № 2, с. 411.
- [55] Силин В.П. Введение в кинетическую теорию газов (М.: Наука, 1971)
- [56] Скал А. С., Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. — Письма в ЖЭТФ, 1973, т. 17. № 4, с. 522.
- [57] Смирнов Б. М.— Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М., Атомиздат, 1968.
- [58] Смирнов Б.М. 1983.
- [59] Соколова И. А.— ЖПМТФ. 1971, № 5, с. 168.
- [60] Сон Э.Е., Теплофизические свойства высокотемпературных сред, изд. МФТИ, г.Долгопрудный, 1977.
- [61] Сон Э.Е. Кинетические уравнения плазмы. Энциклопедия по физике низкотемпературной плазме, Изд-во Наука, 2000 г.
- [62] Сон Э.Е. Процессы переноса в турбулентной низкотемпературной плазме. Энциклопедия по физике низкотемпературной плазме, Изд-во Наука, 2000 г.
- [63] Старостин А.Н. Некоторые вопросы теории неидеальной плазмы. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук. М., МГУ, 1970.
- [64] Суслов О. Н., Тирский Г. А., Щенников В. В. — ЖПМТФ, 1971, № 1, с. 73.

- [65] Тирский Г. А.— Докл. АН СССР, 1964, т. 155, № 6, с. 1278, Прикл. мат. и механика, 1969, вып. 1, с. 180.
- [66] Тирский Г. А.— Отчет НИИМ МГУ, 1969, № 1016.
- [67] Ферцигер Г., Капер Дж. Математическая теория процессов переноса в газах. пер. с англ. М., Мир, 1976.
- [68] Фортов В.Е. УФН. 1982. Т. 138. вып.3 С. 361-412.
- [69] Фортов В.Е., Якубов И.Т. Неидеальная плазма (М.: Энергоатомиздат, 1994)
- [70] Франк-Каменецкий Д. А. — Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М., Наука, 1967.
- [71] Храпак А. Г.— ТВТ, 1975, т. 12, № 6, с, 1343.
- [72] Храпак А.Г., Якубов И.Т. ТВТ. 1971. Т. 9, № 7. С. 1139-1150.
- [73] Храпак А.Г., Якубов И.Т. Электроны в плотном газе М.: Наука 1988.
- [74] Чепмен С., Каулинг Т. Математическая теория неоднородных газов, М.,ИЛ.1960.
- [75] Чо С., Уленбек Дж., в кн. Дж.Уленбек, Дж.Форд, Лекции по статистической механике, "Мир",1965.
- [76] Якубов И.Т. Электропроводность неидеальной плазмы, УФН, т.163, N 5, с. 35-51.
- [77] Abrachamson A. A. — Phys. Rev., 1969. v. 178, N 1, p. 76.
- [78] Alekseev V.A., Iakubov I.T. // Handbook of Thermodynamic and Transport Properties of Alkali Metals. /Ed. R.W.Ohse. Oxford: Blackwell, 1985. Ch. 7. 1. P. 703.
- [79] Balescu R. Phys.Fluids, 1961, V.3, P.52.
- [80] Balescu R., Statistical Mechanics of Charged Particles, Interscience, New York, 1963
- [81] Bender C. F. Davidson E. R. — J. Chem, Phys., 1968, v. 49, N 11, p. 4222.
- [82] Bepalov I.M., Polishchuk A.Ya., Preprint Inst. High Temp. (IVTAN), N 1-257, Moscow, 1988
- [83] Bepalov I.M., Polishchuk A.Ya., Pisma V Zh. Tekhn. Fiz. (USSR), 15 (1989) no. 2, 4
- [84] Bepalov I.M., Polishchuk A.Ya., Fortov V.E., Pisma V Zh. Tekhn. Fiz. (USSR), 16 (1990) no. 11, 80
- [85] Blumlein J., Kraeft W.-D., Meyer Th. Ann. der Phys., 1982 F.7, S.379
- [86] Blumlein J. Contrib. Plasma Phys., 1986 V.26, P.267, 335, 343.
- [87] Boercker D.B. Phys. Rev. A. 1981. V. 23, P. 1923.
- [88] Boercker D.B., Rogers F.G., De Witt H.E. Phys. Rev. A. 1982. V. 25, P. 1923.

- [89] Brandes E.A., Ed., *Smithells Metals Reference Book*, 6-th edition, Butterworth and Co., London, 1983
- [90] Brysk H., Campbell P.M., Hamerling P., *Plasma Phys.* 17 (1975) 473
- [91] Butler J.N., Brokaw R.S. - *J. Chem. Phys.*, 1957, v. 26, N 6, p. 1636.
- [92] Cauble R., Boercker D.B. *Phys. Rev. A.* 1983. V. 28, P. 944.
- [93] Chang C. K., Walker R. H.— *Phys. Rev.*, 1969, v. 178, N 1, p. 198.
- [94] Cohen M. N., Jortner J.— *Phys. Rev.*, 1974, v. A10, N 5, p 978.
- [95] Devoto R. S.— *Phys. Fluids*, 1966, v. 9. N 6, p. 1230.
- [96] Eberling W., Fortov V., Forster A. e.a. *Thermophysical Properties of Hot Dense Plasmas*. AVG. Leipzig, 1991.
- [97] Eberling W., Fortov V.E., Klimontovich Yu.L., Kovalenko N.P., Kraeft W.-D., Krasny Yu.P., Kremp D., Kulik P.P., Riaby V.A., Röpke G., Rozanov E.K., Schlanges M., *Transport of Dense Plasmas*, Akademie-Verlag, Berlin, 1983, Birkäuser, Basel, 1984
- [98] Ebeling W., Ropke G. *Annalen der Physik.* 1979. F. 7, S. 429.
- [99] Erhard W. R., Helbing R. K. B.— *J. Chem. Phys.*, 1968, v. 49, 12. p. 4750.
- [100] Evans R., Gyorfy B.L., Szabo N., Ziman J.M., in: *The Properties of Liquid Metals*, S. Tukeuchi, Ed., John Wiley, New York, 1973
- [101] Fortov V.E., Mintsev V.B., Dryaznov V.K., *Zh. Eksp. Teor. Fiz. (USSR)* 79 (1980) 116
- [102] Frost S.L., *J. Appl. Phys.*, 32, 2029, 1961.
- [103] Gathers G.R., *Int. J. Thermophys.* 4 (1983) 209
- [104] Gentry W. B., Mahan H. B.— *J. Chem. Phys.*, 1968, v. 49, N 5, p. 1758.
- [105] Gitterman M., Steinberg V. - *Phys. Rev. Lett.*, 1975, v. 3, N 11, p. 1588.
- [106] Good R. J., Hope C. J. — *J. Chem. Phys.*, 1970, v. 53, N 2, p. 540.
- [107] Gould H.A., De Witt H.E., *Phys. Rev.*, 155, 68, 1967.
- [108] Granfill C.W., More R.M., *Los Alamos Sci. Lab. Rep. LA-7313-MS*, Los Alamos, 1978
- [109] Hansen J.P., McDonald I.R., Pollock E.L. *Phys. Rev.* 1975. V. 11, P. 1025.
- [110] Helbing R. K. B., Rothe E. W. — *J. Chem., Phys.*, 1968, v. 48, N 9, p. 3549.
- [111] Hensel F., Frank F. U. — *Rev. Mod. Phys.*, 1968. v. 40, N 3, p. 677.
- [112] Ichimaru S., Mitake S., Tanaka S., Yan X.-Z., *Phys. Rev. A* 32 (1985) 1768
- [113] Ichimaru S., Tanaka S., *Phys. Rev. A* 32 (1985) 1790

- [114] Ivanov Yu.V., Mintzev V.B., Fortov V.E., Dremin A.N., Zh. Eksp. Teor. Fiz. (USSR) 71 (1976) 216
- [115] Kieffer L. J. — Atomic Data on Electron Collision with Atoms and Molecules Boulder, Colorado, Pergamon Press, 1973.
- [116] Kraeft W.D., Kremp D., Ebeling W., Ropke G. Quantum Statistics of Charged Particle Systems. New York: Plenum. 1986.
- [117] Kraeft W.-D., Kremp D., Eberling W., Röpke G., Quantum Statistics of Charged Particle System, Akademie-Verlag, Berlin, 1986, Plenum Press, New York, 1986, Mir Publ. (Russ. Transl.), Moscow, 1988
- [118] Kraeft W.D., Luft M., Mihailov A.A. Physica. 1983. V. 120A, P. 263.
- [119] Krupenie P. H., Mason E., Vanderslice T. T. — J. Chem. Phys., 1963, v. 39, N 6, p. 2399.
- [120] Kubo R. 1965.
- [121] Lampe M., Phys. Rev. 170 (1968a) 306
- [122] Lampe M., Phys. Rev. 174 (1968b) 276
- [123] Lee P.H., Ph.D. Thesis, Univ. of Pittsburgh, 1977
- [124] Lee Y.T., More R.M., Phys. Fluids 27 (1984) 1273
- [125] Lenard A., Am. Phys, 10, 390, 1960.
- [126] Lick M., Wilbert J., Emmons H. W. — Transport Properties of Helium from 200 K to 50 000 K. Cambridge, pergamon Press, 1965.
- [127] Lokke W.A.,Grasberger W.H., Lawrence Livermore Nat.Lab. Rep. UCRL-52276, 1977
- [128] Martin P. C., Yip S.— Phys. Rev., 1968, v. 170, N I p. 151.
- [129] Mason E. A., O'Hara H., Smith F. J. — J. Phys., 1972, v. B5, N 1, p. 169.
- [130] Meister C.-V., Ropke G. Annalen der Physik. 1982. F. 7, S. 133.
- [131] Meyer T., Tkachenko I.M. Contrib. Plasma Phys. 1985, V.25, P.437.
- [132] Mitake S., Tanaka S., Yan X.-Z., Ichimaru S., Phys. Rev. A 32 (1985) 1775
- [133] Mobius A., Goedsche F., Vojta G. Physica. 1979. V. 95a, P. 294.
- [134] Munn R. J., Mason E. A., Smith F. j. — J. Chem. Phys, 1964, v. 41. N 9, p. 3978, Phys. Fluids, 1965, v. 8, N 6, p. 1103, 1907.
- [135] Ng A., Parfeniuk D., Celliers P., Da Silver L., More R.M., Lee Y.T., Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 1595
- [136] Van Oderhoven F.J.F., Schram P.P.J.M., Physica A 133 (1985) 74
- [137] Perrot F., Dharma-Wardana M.W.C. Phys. Rev. A. 1987. V. 36, N 1. P. 238.

- [138] Polishchuk A.Ya., Preprint Inst. High Temp., N 1-267, 1989a
- [139] Polishchuk A.Ya., Pisma V Zh. Tekhn. Fiz. (USSR), 15 (1989b) no. 10, 24
- [140] Polishchuk A.Ya., Teplofiz. Vys. Temp. (USSR), 28 (1990) 877
- [141] Renkert H., Hensel P., Frank E.U. Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 1971. Bd 75. N 6. P.507-512.
- [142] Rinker G.A., Los Alamos Nat. Lab. Rep. LA-10404-MS, Los Alamos, 1985a
- [143] Rinker G.A., Phys. Rev. B 31 (1985b) 4207
- [144] Rinker G.A., Phys. Rev. B 31 (1985c) 4220
- [145] Rinker G.A., Phys. Rev. A 37 (1988) 1284
- [146] Rogers F.J., De Witt H.E., Boercher D., Phys. Lett A 82 (1981) 331
- [147] Rogers F.J., Young D.A., De Witt H.E., Ross M., Phys. Rev. A 28 (1983) 2990
- [148] Ropke G., Ebeling W., Kraeft W.-D. Physica. 1980. V. 101A, p. 243.
- [149] Ropke G., Christoph V. I. Phys. 1975. V. 8, p. 3615.
- [150] Ropke G., Hohne F.E. I. Phys. Stat. Sol. 1981. V. 107, p. 603.
- [151] Röpke G., Phys. Rev. A 38 (1988) 3001
- [152] Röpke G., Redmer R., Phys. Rev. A 39 (1989) 907
- [153] Schneidermann S. B. — NASA CR — 213, 1965.
- [154] Smith F. J., Munn R. J. — J. Chem. Phys., 1964. v. 4i, N 9, p. 3560.
- [155] Spitzer L., Harm R. - Phys. Rev., 1953, v. 89, N 5, p. 977.
- [156] Spitzer L., Physics of fully Ionized Gases, Wiley, New York, 1962
- [157] Tanaka S., Mitake S., Yan X.-Z., Ichimaru S., Phys. Rev. A 32 (1985) 1779
- [158] Tsoar N., Phys.Rev. B v.20, N 5 P.1306.
- [159] Tsoar N., Platzman P.M. Phys.Rev. B v.20, N 10 P.4189.
- [160] Uhlenbeck G.E., Ford G.W. Theory of Linear Graphs (Amsterdam, 1965, p. 211)
- [161] Vieillenfosse P., Hansen J. P. — Phys. Rev., 1975, v. A 11, N 6, p. 1106.
- [162] Walter H. R. J. — J. Phys., 1973, v, B6, N 6, p. 1003.
- [163] Wild H.W., Pines D., Phys. Rev., 127, 1851, 1962.
- [164] Williams R.H., De Witt H.E., Phys. Fluids 12 (1969) 2326
- [165] Wilson J.R., Metallurg. Rev. 10 (1965) 381
- [166] Yan X.-Z., Tanaka S., Mitake S., Ichimaru S., Phys. Rev. A 32 (1985) 1785

- [167] Yos J.J. Transport Properties of N₂O, Hand air up to 300000 AVCO-RAD-TM-63-7, AVCO Corp., Wilmington, Mass, 1963.
- [168] Ziman J. M. — Phil. Mag., 1961, v. 6, N 6, p. 1013.
- [169] Ziman J.M., Principles of Theory of Solids, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1969
- [170] Ziman J.M., Phil. Mag. 1968, v.13, N 1, p.546.